

博士学位论文

调制光晶格中玻色子系统的量子相变以及
临界性质的研究

**QUANTUM PHASE TRANSITION AND
CRITICAL PROPERTIES FOR TUNED
SYSTEM OF BOSONS ON OPTICAL
LATTICES**

汪涛

哈尔滨工业大学

2015年6月

国内图书分类号: TM301.2
国际图书分类号: 62-5

学校代码: 10213
密级: 公开

理学博士学位论文

调制光晶格中玻色子系统的量子相变以及 临界性质的研究

博士研究生: 汪涛

导 师: 侯春风教授

申 请 学 位: 理学博士

学 科: 物理

所 在 单 位: 理学院

答 辩 日 期: 2015年6月

授予学位单位: 哈尔滨工业大学

Classified Index: TM301.2

U.D.C: 62-5

Dissertation for the Doctoral Degree in Engineering

QUANTUM PHASE TRANSITION AND CRITICAL PROPERTIES FOR TUNED SYSTEM OF BOSONS ON OPTICAL LATTICES

Candidate:	Tao Wang
Supervisor:	Prof. Chun-Feng Hou
Academic Degree Applied for:	Doctor of Science
Specialty:	Physics
Affiliation:	School of Science
Date of Defence:	June, 2015
Degree-Confering-Institution:	Harbin Institute of Technology

摘 要

光晶格中的超冷玻色子气体的研究近来引起了人们广泛的兴趣，因为它在固体理论和超冷量子气体系统这两个领域之间搭建起了一个桥梁。而且，由于系统的各种参数可以很容易通过实验手段进行调节，它可以被当做是一个适用范围广泛的量子模拟器。近年来，人们开始把兴趣导向更为复杂的光晶格系统，因为这些复杂的系统中往往包含更为复杂的量子行为。本论文主要研究调制光晶格中的玻色子系统，包括超光晶格系统中的玻色子系统和伴随S-波散射长度周期性调制光晶格中的玻色子系统的量子相变和临界性质。

在超光晶格中，由于人为进行的调制，相对于普通的光晶格，系统的平移对称性被破坏，从而导致了更为复杂的相图和临界性质。为了研究超光晶格系统的相图，我们把由Axel Pelster教授小组的金兹堡-朗道有效势理论从单参数推广到多参数的情况。研究表明由于平移对称性的破坏，系统出现了密度波态。我们研究了系统的莫特绝缘态和密度波态之间的竞争关系，给出了正方晶格和立方晶格的相图。得到的相图与精确地数值模拟方法的比较证明了推广的有效性。

然后用这种推广的方法分析了阻错超光晶格的相图和临界性质。对这种更为复杂的几何形状的光晶格进行空间平移对称性的破坏调制不仅会使得系统出现密度波态，还会使系统出现新的超流现象。对于三角超光晶格和笼壁超光晶格中的玻色子系统，文中给出了系统的相图。而对笼壁超光晶格的临界行为的分析表明，系统出现了在不同的方向的超流密度不同且出现随系统参数改变而交替领先的现象。我们的研究加深了人们对超光晶格系统和超流现象的理解。

对于光晶格中的玻色子系统，除了在空间范围内进行调制之外，还可以在时间周期上进行调制。本论文中我们研究的另一种调制就是使系统Feshbach共振的S-波散射长度在时间上周期性的振动。首先把这种随时间周期性变化的系统的哈密顿量等效为一个与时间无关的哈密顿量。用多种解析方法和数值模拟分析系统的相图后，发现虽然存在周期性的变化，但是系统中仍然存在从莫特绝缘态到超流态的相变，而且，这种相变与S-波散射长度的振幅相关。进一步详细的分析表明在系统的振幅幅度小于一定数值时，如果重新标度系统的跃迁幅度，系统可以用一种类似于玻色-哈伯德模型的哈密顿量来表示。该发现表明此时系统与玻色-哈伯德模型具有相同的临界性质，他们的临界行为应该属

于同一类。而当S-波周期调制振幅较大时，我们发现现有的解析和数值方法都不能给出可信的结果。为了研究此时系统的量子相变和临界性质，我们将注意力转向了一种最近新出现的算法-过程链算法。我们首先在普通的光晶格系统中使用我们的算法，将得到的数值结果跟量子蒙特卡罗模拟结果进行了对比，证明了我们的方法的有效性。然后我们将这种算法运用到S-波散射长度周期性振动的二维晶格系统中，发现当系统的S-波散射振幅的长度增大时，系统的相图会发生明显的变化，而系统此时再也不能用一个类似哈伯德模型的哈密顿量来描述。

关键词： 量子相变；超光晶格；周期性振动；超流；过程链

Abstract

Systems of ultracold bosonic gases in optical lattices represent nowadays a popular research topic, as they establish a versatile bridge between the field of ultracold quantum matter and solid-state systems. In particular, they can be experimentally controlled with a yet unprecedented level of precision. With this it allows for a clear theoretical analysis and which are even predestined as universal quantum simulators. Recent research efforts have targeted more complex systems, because in this system the corresponding phase diagrams become richer and more complex. In this thesis, we study the quantum phase transition and critical properties for Bosons on optical lattice, including the superlattice system and S-wave periodically driven system.

For optical superlattice system, due to artificially tuned, the translational symmetry has been broken, which induced more complex quantum phase diagram and critical behavior. To study the phase diagram we generalize a recently established effective potential Landau theory for a single component to the case of multi components. We find not only the characteristic incompressible solid phases with fractional filling, but also obtain the underlying quantum phase diagram in the whole parameter region at zero temperature. The analytical of the critical points of the phase lobes shows the competition of Density-Wave phase and Mott phase. Also the comparison of the phase diagram that we got with the high accuracy of the Quantum Monte Carlo simulation proves the efficiency of the generalization.

Then we use the Generalized Effective Potential Landau Theory method to study the frustrated optical superlattice system. The tune of these more complicated systems not only make the Density Wave phase appear, but also shows the new phenomenon of the superfluid. The study of the critical behavior of Kagome optical superlattice reveals that the bias of the anisotropy of the superfluid density is alternating between different direction while detuning the parameter of the system.

Apart from the tune on the real space as superlattice system, another tuned optical lattice system that we study in this thesis is the Bosons on optical lattice with a periodic modulation of the S-wave scattering length. At first we map the underlying periodically driven Bose- Hubbard model approximately to an effective time-independent Hamiltonian with a conditional hopping. Combining different analytical approaches with quantum

Monte Carlo simulations then reveals that the superfluid-Mott insulator quantum phase transition still exists despite the periodic driving and that the location of the quantum phase boundary turns out to depend quite sensitively on the driving amplitude. A more detailed quantitative analysis shows even that the effect of driving can be described within the usual Bose-Hubbard model provided that the hopping is rescaled appropriately with the driving amplitude when the driven amplitude is smaller than some certain value. This finding indicates that the Bose-Hubbard model with a periodically driven s-wave scattering length and the usual Bose-Hubbard model belong to the same universality class from the point of view of critical phenomena. For the system of Bosons on optical lattice with a periodic modulation of the s-wave scattering length, when the driven amplitude goes larger, our analytical and numerical method will be not suitable. This made us turn our interest to the newly developed numerical method-process-chain method. We first check our program by using it to calculate the strong coupling method and effective potential theory to high order for the Bose-Hubbard model. The result that we get comparing with the numerical simulation result shows that we have very high accuracy. Then we use it to study the phase diagram of the system of Bosons on optical square lattice with a periodic modulation of the s-wave scattering length. We found that when the driven amplitude goes larger, the shape of phase diagram of the system will change, which indicates that we can not use a Bose-Hubbard like effective Hamiltonian to describe the system anymore.

Keywords: quantum phase transition, superlattice, periodically-driving, superfluid, process-chain

摘 要.....	I
ABSTRACT	III
第 1 章 绪论	1
1.1 研究背景.....	1
1.2 研究的目的和意义.....	5
1.3 调制光晶格系统的理论和实验研究进展	6
1.3.1 超光晶格中的实验和理论进展	6
1.3.2 周期性调制光晶格中的玻色子气体的实验和理论进展	8
1.4 论文的主要研究内容	10
第 2 章 广义朗道有效势理论及其在超光晶格中玻色子系统的应用	11
2.1 引言.....	11
2.2 光晶格中玻色子系统的基本理论	11
2.2.1 光晶格的形成.....	12
2.2.2 光晶格中玻色子系统的哈密顿量.....	14
2.2.3 实验上对光晶格中玻色子哈密顿量中各参数的调节.....	15
2.2.4 光晶格中玻色子系统的量子相变.....	18
2.3 超光晶格的形成及系统哈密顿量	19
2.4 广义朗道有效势理论	23
2.4.1 朗道对称破缺理论.....	23
2.4.2 光晶格中玻色子的朗道有效势理论	25
2.4.3 多参数的朗道有效势理论	27
2.5 正方和立方超光晶格的相图的计算	29
2.6 微扰论的图形表示方法.....	32
2.7 广义朗道有效势理论和解耦合平均场理论的对比	34
2.8 本章小结.....	36
第 3 章 阻错超光晶格中玻色子系统的相图以及临界性质的研究	37
3.1 引言.....	37
3.2 关于实验上实现阻错超光晶格系统的建议.....	37
3.3 阻错超光晶格中玻色子系统的量子相图	39

3.4 笼壁超光晶格中的各向异性的超流	44
3.5 本章小结.....	46
第4章 周期性调制的S-波散射长度对光晶格中玻色子量子相变的影响	48
4.1 引言.....	48
4.2 周期性调制系统的一些基本概念	49
4.3 伴随S-波周期性调制的光晶格中的玻色子系统的哈密顿量	55
4.3.1 与时间相关的哈密顿量.....	55
4.3.2 等效的不含时的哈密顿量	57
4.4 伴随S波周期性调制光晶格中玻色子系统的朗道有效势理论.....	58
4.4.1 一阶结果.....	59
4.4.2 二阶的结果	62
4.5 用过程链算法计算伴随S波周期性调制的光晶格中玻色子系统的 相图.....	69
4.5.1 过程链算法简介	70
4.5.2 程序的有效性检查.....	74
4.5.3 伴随S-波周期性调制的光晶格玻色子系统的量子相图	80
4.6 未来关于S-波周期调制系统的研究计划	81
4.7 本章小结.....	84
结 论.....	85
参考文献	87
攻读博士学位期间发表的论文及其他成果	97
哈尔滨工业大学学位论文原创性声明和使用权限	98
致 谢.....	99
个人简历	100

Contents

Abstract (In Chinese)	I
Abstract (In English)	III
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Research Background	1
1.2 Objective and significance of the research	5
1.3 Progress of experiments and theory of tuned system of Bosons on optical system	6
1.3.1 Progress of the experiments and theory for Bosons on optical superlattice system	6
1.3.2 Progress of the experiments and theory for Bosons on periodically tuned optical lattice	8
1.4 Main structure of the theses	10
Chapter 2 Generalized Effective Potential Landau Theory for Bosonic Superlattices	11
2.1 Brief introduction of the chapter	11
2.2 Basic theory and concept for Bosons on optical lattice	11
2.2.1 Formation of the optical lattice	12
2.2.2 Hamiltonian for the Bosons on optical lattice	14
2.2.3 The experimental control of the parameters of the Bose-Hubbard Hamiltonian	15
2.2.4 Quantum phase transition for Bosons on optical lattice	18
2.3 Formation of the superlattice system and its Hamiltonian	19
2.4 Generalized Effective Potential Landau Theory	23
2.4.1 Landau's symmetry Broken Theory	23
2.4.2 Effective potential Landau Theory for Bosons on optical lattice	25
2.4.3 Multi-components effective potential Landau theory	27
2.5 Quantum phase diagram for the square and cubic optical superlattice	29
2.6 Diagram presentation of the perturbation theory	32
2.7 Comparision to the decoupled mean-field theory	34

2.8 Conclusion of the chapter	36
Chapter 3 Research of the quantum phase diagram and critical properties of Bosons on frustrated superlattice system	37
3.1 Introduction	37
3.2 Experimental suggestion for Frustrated superlattice	37
3.3 The quantum phase diagram for bosons on frustrated optical superlattice system	39
3.4 Anisotropic superfluidity of Bosons on kagome optical superlattice	44
3.5 Conclusion of the chapter	46
Chapter 4 Tuning the Quantum Phase Transition of Bosons on Optical Lattices via Periodic Modulation of s-Wave Scattering Length	48
4.1 introduction	48
4.2 Some Basic Concepts about the Periodic Driven System	49
4.3 Hamiltonian for Bosons on optical lattice with S-wave periodically driven ...	55
4.3.1 Time-dependent Hamiltonian	55
4.3.2 Effective time-independent Hamiltonian	57
4.4 Landau effective potential theory for Bosons on optical lattice with S-wave periodically tuned	58
4.4.1 The first order result	59
4.4.2 Second order result	62
4.5 Process-chain method for Bosons on optical lattice with S-wave periodically tuned	69
4.5.1 Brief introduction process-chain method	70
4.5.2 Check the validity of our program	74
4.5.3 Quantum phase diagram for Bosons on optical lattice with S-wave periodically tuned	80
4.6 Future research plan for system with S-wave periodically tuned	81
4.7 Conclusion of the chapter	84
Conclusions	85
References	87
Papers published in the period of PH.D. education	97
Statement of copyright and Letter of authorization	98
Acknowledgements	99

Contents

Resume 100

第1章 绪论

1.1 研究背景

通过运用由Satyendra N. Bose发展的一种新的量子统计方法^[1]，爱因斯坦预言了理想玻色子气体在极冷的情况下可能出现一种新的状态^[2]：玻色-爱因斯坦凝聚（BEC）。根据他的理论，把理想玻色子气体降低到一个临界温度 T_c ，系统就会发生相变。根据这些想法，在1938年的时候，F. London认为在 ^4He 中存在的超流现象可以通过BEC现象来解释。虽然爱因斯坦的理论是关于理想玻色子气体的，而 ^4He 是一种强耦合系统，但是随后的中子散射实验证实了London的推论是正确的。

尽管理论上对BEC现象的预言很早，但是直到70年后，人们才在实验室里实现它，这主要是因为它需要极低的温度。到二十世纪八十年代早期，激光冷却技术的发展使得人们可以将温度冷却到毫开量级，这才使得BEC得以在实验室中呈现。为此，Chu, Cohen-Tannoudji和Phillips因为激光冷却技术得到了1997年的诺贝尔奖，而Cornell, Ketterle和Wieman因为实现了玻色-爱因斯坦凝聚而获得了2001年的诺贝尔奖。

激光冷却效应的基本原理是利用多普勒效应使得热运动的原子中沿着激光光源方向运动的比背向激光光源方向运动的吸收更多的光子，要获得这种效应，人们必须使激光的频率比原子中电子的跃迁频率小一点。这样，由于多普勒效应，朝着光源的方向运动的原子“看到”激光的实际频率正好为原子的跃迁频率。这时，原子会吸收光子，同时由于动量守恒，它也会吸收光子的动量，然后它就要开始辐射原子。如果是受激辐射的话，原子的动量不减少，因为辐射的光子和原光子的运动方向相同，但是如果是自发辐射的话，原子的动量就会减少，因为自发辐射的光子的平均动量为零。因此，总的效应会使系统的动能减少，由此降低系统的温度。在真实的实验中，一般首先让原子通过一个磁场来改变原子的能级差，以便让原子的固有频率和激光的频率匹配，这个过程被称为塞曼减速^[3]。然后原子通过沿着各方向传播的激光光场中，原子可以在几个微秒之内被降低到毫开尔文量级。图1-1给出了激光冷却和蒸发冷却的原理示意图。

在所有的原子中，碱原子由于其独特的电子结构以及可用现有的激光实现，在实验室中最先被实现激光冷却。而且，实验室中还可以进一步的用蒸

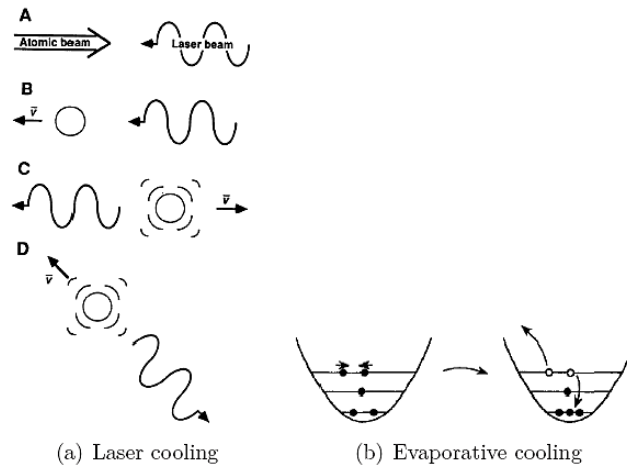


图 1-1 激光冷却及蒸发冷却示意图^[4]

Fig. 1-1 Laser cooling and evaporation cooling^[4]

发冷却来给系统继续降温。这个方法是连续的降低限制原子的光势场的强度，从而使得那些动能比较大的原子跑掉。经过这两步之后，我们就实现了达到BEC所必须的温度条件。

最终，在1995年，人们终于在实验室中实现了BEC。在这些实验中，人们让原子从限制它们的磁势阱中释放出来，并让它们自由的运动几个毫秒，然后用CCD照相机来得到冷原子系统展开后的图像。由于原子的运动时间足够长，原子原来的位置可以忽略不计，因此，人们得到的图像中的粒子的位置分布就是原系统中粒子的动量分布。图 1-2中，从左到右分别是表示系统的温度为400、200、50纳开尔文。我们可以看到，当系统的温度为200、50纳开尔文的时候，有明显的大量的粒子占据在低动量态，据此可以判断，系统存在玻色-爱因斯坦凝聚，而在系统的温度为400纳开尔文时，系统显然由于过于“热”而没有玻色-爱因斯坦凝聚。激光冷却技术的实现也让人们开始在实验室中去建造光晶格。动机是源于R. Feynman在1982年提出的一种全新的物理的研究方法，即我们不去计算那些复杂的物理系统的数学解（这些解通常很复杂以至于很难得到），而是去精确的模拟自然界的过成，从而控制改变各种参数得到我们想要的结果。这些后来被总结为建造量子模拟器。我们知道用普通的电脑去模拟量子系统的行为是非常困难的。比如对于最简单的包含 N 个自旋为 $1/2$ 的粒子的系统，它有 2^N 个态，这样对于30个粒子组成的系统来说，我们现在的电脑就很难去模拟它。而光晶格是一个很完美的量子模拟器，我们可以非常方便的调整系统的参数，而且有多种实验方法来探测系统的性质。光晶格实际就是空间的驻波，由于斯塔克效应，原子被限制在驻波的光强的极大值或极小值处。关

于原子为何可以被限制在光晶格中，我们会在后面进行详细的理论介绍。如图1-3显示的各种几何形状的光晶格，(a)为正方晶格，(b)为立方晶格，(c)是一维的光链，(d)是三角晶格，(e)是笼壁晶格。

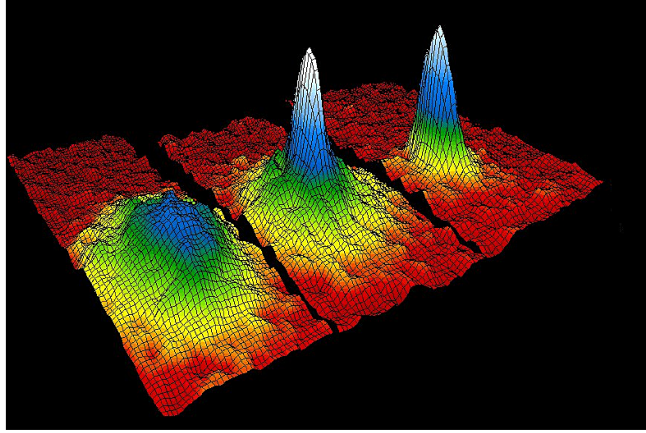


图 1-2 玻色-爱因斯坦凝聚的动量分布图^[7]

Fig.1-2 BEC condensate momentum distribution^[7]

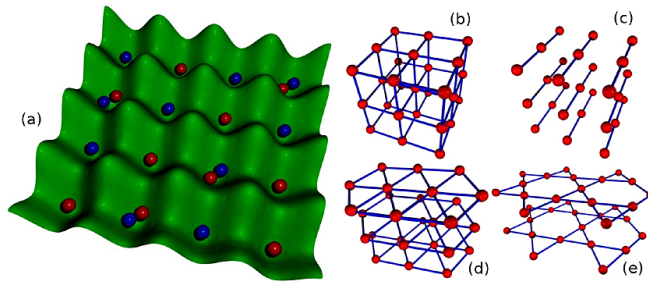


图 1-3 各种形状的光晶格^[8]

Fig.1-3 Different geometry optical lattices^[8]

根据布洛赫原理，任何周期性势场中的原子的能级都具有能带结构，即能带之间存在能隙的结构。这就使得我们可以用它来研究原本在凝聚态物理中的周期性结构的物质。而且对比起来它有很多优势，除了是完美无缺陷的晶体外，它还有很多可以调节的参数。甚至它的势场可以使随时间周期性变化的或者是完全消失掉（在研究系统的飞行时间实验图像时）。

光晶格系统的能带结构甚至在BEC被制造出来之前就已经在实验上被发现了^[5]，在该实验中，温度为毫开的气体在强外力的驱使下在系统的不同的能带之间跃迁，这被称之为Landau-Zener 效应。Anderson和Kasevich曾经设计了一个实验，利用重力使光晶格中的BEC依次通过一个垂直的光晶格来证实该效应的存在^[6]。

光晶格中的BEC现象比磁势阱中的BEC展现出了更为丰富的物理，这是因为毫开级别的冷原子系统的密度通常是 10^{10}cm^3 ，而纳开级别的冷原子系统密度通常是 10^{14}cm^3 或更高。这种极低的温度可以保证系统的光晶格势场逐渐被从零加大时，系统的粒子仍然占据在基态。这种更高的密度会使系统的粒子占据数远远大于在磁势阱中的 10^{-3} ，而这会显著的增加BEC原子之间的相互作用力，而在磁势阱中这种作用力经常被忽略掉。

当BEC被载入浅的晶格系统中，系统是一种弱耦合作用的状态，但是随着光晶格的深度逐渐加深，系统进入了一种强耦合状态。这种增强的势能会导致系统的能带之间的能隙加大，从而使高能带的粒子数量显著的压缩，因此，在这种情况下，我们只需要考虑系统的最低能带。在这种情况下，我们可以用玻色-哈伯德模型来很好的描述系统。

强耦合作用最为显著的作用是使系统发生了从超流态到莫特绝缘态的相变。该相变最早由Fisher^[9]对玻色-哈伯德模型的分析预言而由Greiner在实验上证实^[10]。在玻色-哈伯德模型中，存在着两种相互竞争的能量：一种是跃迁动能，它表示从一个格点跃迁到相邻格点的跃迁概率大小；另一种是格点上的势能，它表明的是相同格点上的原子的两体相互作用的大小。当跃迁动能远远大于系统的势能时，粒子可以在系统中自由的跃迁，这时，系统处在超流态；而当系统的势能远远大于跃迁动能时，系统的粒子被局域在各个格点上，此时系统处于莫特绝缘态。这些不同的态可以通过飞行时间实验来证明，图1-4从左到右，光晶格的深度为(a) $8E_R$, (b) $14E_R$, (c) $18E_R$, (d) $30E_R$ ， E_R 是系统的反冲能量，在后面我们会给出它的定义。图中从左到右显示了系统从超流态到莫特绝缘态的变化。飞行时间实验（time-of-flight）得到的图像是系统的动量分布的干涉图像，可知，在超流态时，系统的位置完全不确定，因此粒子的动量完全确定，因此波函数会产生干涉，形成干涉的峰值图，而由于布洛赫函数的修饰，因此会产生亮度不同的峰。而在莫特绝缘态，粒子的位置完全固定，因此粒子的动量完全不确定，因此不会产生干涉，而是模糊的一团。需要指出的是飞行时间实验可以确定系统发生了相变却不能确定系统发生相变的具体时间。

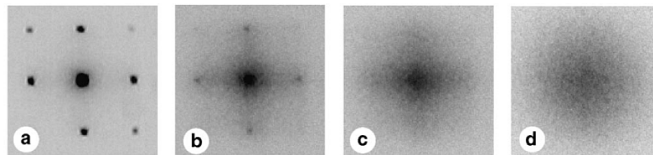


图 1-4 光晶格的飞行时间实验图像^[10]

Fig.1-4 Time-of-flight picture of optical lattice^[10]

除了从莫特绝缘态到超流态的相变外，人们还发现了强耦合区域系统关联的丧失。比如I. Bloch^[10]等人使系统快速的从超流态变化到莫特绝缘态时，观察到了宏观的物质波。更重要的是，他们观察到了系统的BEC的崩溃和恢复。

1.2 研究的目的是和意义

上面介绍了本论文的研究背景，即人们在实现了玻色-爱因斯坦凝聚后，也在实验上实现了将超冷玻色子气体导入光晶格中。作为一个完美的量子模拟器，光晶格中的玻色子气体系统从一出现就引起了人们广泛的兴趣，不仅是因为它搭建起了固体理论和超冷量子气体之间的桥梁^[11]，而且它的所有参数都可以在实验上很精确的调节^[12]，便于与理论比较。在大量的实验和理论上对光晶格的分析之后，人们开始把兴趣转向更为复杂的光晶格系统^[13-17]，因为在这些系统中有更为复杂的量子现象。在光晶格上加上人工调制是一种将系统变得更为复杂的方法。本论文主要的研究对象是两种调制的光晶格，一种是人为的破坏系统的平移对称性，即引入额外的光束使得系统形成可以分割为互相耦合的子系统的超光晶格；另一种是使Feshbach共振的S-波散射长度周期性的振动，使得系统的哈密顿量周期性的变化，在一个周期的时间平均上，系统的哈密顿量将会变得更加复杂。本论文的主要研究目的是运用各种解析和数值的方法来研究这两种调制的光晶格系统的量子相变的相图和它的临界的一些物理性质。本论文的研究意义在于扩展我们现有的解析和数值方法，探索这两种光晶格中新的物理现象，加深人们对这两种光晶格中玻色子系统的理解，为以后的实验研究提供理论支持。

我们之所以选择这两种调制光晶格中的玻色子系统来进行研究是因为：对于超光晶格系统来说，它是一种最为简单的多参数系统，可以用来验证我们对朗道有效势方法的推广的有效性，为我们今后解决更为复杂的多体系统打下理论基础。而S-波周期性振动作为一种新近开发的调制手段，主要是应用在光势阱中，在光晶格中的应用目前还缺乏系统的理论和实验研究。而它作为一种量子调制手段可以使系统的哈密顿量的跃迁项变得更为复杂，从而导致系统的量子性质更为丰富，同时也可以使我们能够模拟的系统的种类大为增加。研究这种新的调制手段在光晶格中的应用及其对系统的量子相图和临界性质的影响，可以为以后的实验研究打下理论基础。

1.3 调制光晶格系统的理论和实验研究进展

第一个把原子限制在光晶格的实验是由Grynberg等人在1993年完成^[18, 19], 他们能够将温度降到微开尔文的级别。真正的突破是在1995年实现的玻色-爱因斯坦凝聚^[20], 它可以极大的降低上述系统的温度至纳开级别, 从而导致了一系列的有突破性的实验进展。特别是在2002年, M. Greiner等人在实验上观察到了从超流态到莫特-绝缘体态的相变^[10], 不久后, 他们又证明了该系统中原子的关联特性^[15]。实验上对光晶格的探测方法也更加的丰富, 从开始的飞行时间实验, 绝热映射^[21]到现在能直接探测单个格点的粒子占据数^[22-28]。

理论方面Jaksch等人最早提出来可以用玻色-哈伯德模型来描述光晶格中的超冷玻色子^[29], 并且指出该模型中的相互作用参数可以通过调节光晶格的深度来调节。1989年, M. P. A. Fisher用平均场的方法详细的分析了玻色-哈伯德模型的物理性质, 预言了该模型中存在从超流态到莫特绝缘态的相变, 并且指出, 相边界的上边界是粒子激发, 下边界是空穴激发^[9]。在此基础上, J. K. Freericks等人在1996年运用微扰论的方法得到了较为精确的相边界, 尤其是在一维的时候^[30]。后续的很多人在这两者的基础上发展出了更为复杂的理论来运用到更加复杂的系统, 像从平均场理论^[31]理论和晶胞强耦合展开方法^[32-34]等。数值模拟方面主要有两种方法, 一种是密度矩阵重整化群(DMRG)的方法^[35, 36], 一种是量子蒙特卡洛(QMC)方法^[37-40]。前者基本只适用于一维系统或准一维系统, 不存在符号问题, 可以解决系统的动态问题^[41]。后者存在符号问题, 且不可用于解决系统的动态问题。

1.3.1 超光晶格中的实验和理论进展

在实验上, 2003年, S. Peil等人用包含两种不同周期的超晶格系统实现了对冷原子在超晶格中安放位置的操控。在一维的超光晶格系统中, 他们实现了将处于玻色-爱因斯坦凝聚态的铷原子气体导入到每个晶胞的第三个晶格中。他们的实验为以后的量子计算的研究提供了操作中性质原子的手段^[13]。

2006年, J. Sebby-Strabley等人成功的在实验上设计了一个二维的超光晶格, 在这个超光晶格中, 每个晶胞中包含两个独立的, 深度不同的光势阱。它们可以被独立的调控, 从而来控制中性原子的移动。他们的实验为测试双轨道门的实现提供了可能^[14]。

2008年, P. Cheinet等人在实验上观测到了超光晶格系统中的原子相互作用

势能的阻碍作用。它们利用这种作用力可以控制和观察每个格点上的原子的数目，从而得知整个系统的原子的分布。它们在莫特绝缘态和超流态中分别得到了铷原子的粒子分布^[17]。

在2011年，Y.-A. Chen等人通过在一维超光晶格的相邻势阱中实现AC周期性振动来控制晶格中的冷原子的单粒子和双粒子的跃迁过程。它们的实验为将来在实验上用光晶格中的超冷原子实现XXZ模型的模拟提供了可能^[42]。

在理论上，2004年，P. Buonsante用改进的平均场近似分析了超光晶格系统的有限温度的相图。他们给出了超流和普通流体之间的界限，并在零温极限下得到了系统从莫特绝缘态到超流态的相变的相图^[43]。

2005年，P. Buonsante发展了强耦合的方法从单格点到多个点的情况，细胞强耦合方法分析了系统的相图，并预言了在一维的超光晶格系统中，存在一种叫做环空穴（loop hole）的新的相，而在二维的超光晶格中，这种相不会存在^[44, 45]。

2006年，V. G. Rousseau等人用直接对角化和蒙特卡罗数值模拟的方法给出了超光晶格的精确相图。他们首先给出了在硬核玻色子近似条件下的精确相图，然后推广到软核玻色子的情况，他们还发现了系统出现了从莫特绝缘态到密度波态的改变，而两个态的转换之间，需经过超流态^[46]。

2007年，M. Hild等人研究了随时间变化的一维超光晶格中的玻色子气体系统。在很深的莫特绝缘态的领域，他们给系统一个小的外加的微扰，来研究系统的反应和魔动量的分布。他们的研究揭示了在反应区域内，系统的魔动量分布和外加调制的频率之间的关系，为实验上的观测提供了理论支持^[47]。

2010年，B.-L. Chen等人用解耦合平均场方法研究了超光晶格中单组份和双组份玻色子系统的相图。在这两种系统中，他们发现都存在密度波态。在两组分玻色子的系统中，他们还发现了系统存在等效的自选密度波序^[48]。

2011年，A. Dhar等人用有限尺寸的密度矩阵重整化群的理论研究了一维超光晶格的相图，对于各种不同的系统参数，他们给出了系统的精确相图^[49]。

2012年，T. McIntosh等人发展了一种新的算法-多格点平均场方法并用它来计算超光晶格系统的相图。他们的研究主要是集中在一维系统，在晶胞中的格点数目逐渐增大的情况下，他们的方法仍然可以很好的给出系统的相图，并且预言了系统中许多不同填充数的loop hole的相图^[31]。

1.3.2 周期性调制光晶格中的玻色子气体的实验和理论进展

在实验上对于光晶格的周期性调制方面，早在1997年，Drese和Holthaus就指出可以通过改变周期性调制力的振幅来驱使周期的光晶格系统发生一种类似于从金属态到绝缘态的相变^[50]。但是这个方面真正的变成热点是在2007年，Pisa的实验小组在实验上发现对于BEC的跃迁振幅的压制，甚至可以改变跃迁振幅的符号^[51]。他们的实验和之前的理论预言符合的非常好，证明了这种强的周期性调制不会破坏玻色-爱因斯坦凝聚中的相关联，从而开启了通过强的周期性调制来引发系统的相变的可能。这个实验引起了广泛的关注和兴趣。

2007年，C. Sias等人在实验上观测到了光晶格中的光子帮助跃迁作用。他们的实验是在一个严重倾斜的光晶格中进行的，在该晶格中，由于能量守恒作用，系统的跃迁振幅被严重压制。当他们启动外在的驱动力使得光晶格周期性振动的时候，他们观察到了系统的跃迁振幅的增大^[52]。

2008年，E. Kierig等人在实验上实现了对单粒子在强振动的双光势阱中的全参数的控制，包括振幅，频率，甚至是时间和空间的对称性。他们的实验结果和Floquet所给出的结果在数值上符合的非常好，证明了从Floquet的角度来考虑这种强振动的光晶格系统的可靠性^[53]。

2009年，A. Zenesini等人又报道了将玻色-爱因斯坦凝聚的冷原子绝热的导入到一维，二维，三维的周期性调制的光晶格中后，他们观察到了从超流态到莫特绝缘态的相变^[54]，这个实验无可辩驳的证实了我们可以将周期性的调制当做一种新的量子调制手段。

2011年，J. Struck等人的研究开启了AC周期性调制的一个新的方向-在阻错晶格系统中加上一个时间对称被破坏的周期性振动的外力，使得跃迁项出现相位^[55]。

2013年，J. Struck等人又进一步的实现了用超冷的玻色子原子系统来实现模拟XY自旋系统。他们在三角的超光晶格系统中引入时间对称破缺的项，从而导致了跃迁项上出现了不可被规范变换消掉的角度。这个实验提升了光晶格作为一种量子模拟器的作用^[56]。

2011年，S. E. Pollack等人提出了一种新的周期性调制的方式，与AC调制不同的是他们并不需要直接的振动光晶格，而是让Feshbach共振附近的磁场周期性的震荡，这种磁场的周期性的振动会导致S-波散射长度周期性的振动，从而导致光晶格中的粒子的相互作用出现一个周期性变换的项。这种新的调制方式会导致系统更为复杂的哈密顿量和量子特性^[57]。

在理论方面，在2001年，M. Holthaus提出在双势阱中利用周期性振动的激光可以控制实现玻色-爱因斯坦凝聚的粒子之间的相互作用，并且在文章中指出，Floquet能级在周期性的振动外场下的多粒子相互作用的系统中仍然起非常重要的作用^[58]。

2005年，A. Eckardt等人研究了周期性调制的倾斜的双势阱中的玻色-爱因斯坦凝聚的原子的跃迁，他们发现当逐渐增大系统的周期性调制的振幅之后，系统出现了类似于光子协助跃迁的现象^[59]。

2005年，A. Eckardt等人在理论上证明了可以通过周期性的调制使得玻色-哈伯德模型发生从超流态到莫特绝缘态的相变。他们指出这种相变的发生是因为周期性的调制会抑制系统的跃迁幅度，从而使得等效的跃迁振幅减小。同时他们的文章中也指出怎样绝热的将系统导入Floquet能级，以及实验上怎样用光晶格中的玻色子系统来实现这种相变^[60]。

2007年，A. Eckardt等人在理论上指出可以通过一个周期性振动的共振振幅，实现玻色-哈伯德系统从莫特态到超流态的相变。在一个倾斜幅度很大的光晶格中由于能量守恒，系统始终处于莫特绝缘态，这时如果引入一个与系统倾斜势相等的周期性振动的振幅，在光子的帮助跃迁下，系统就有可能实现从莫特绝缘态到超流态的相变^[61]。

2008年，A. Eckardt等人在理论上提出了怎样在周期性调制的光晶格中去探测宏观物质波之间的共振，这种共振会危害系统的绝热控制，同时他们指出了怎样通过控制系统的参数来避免这种共振的产生。他们的研究同时也指出了缀饰原子和缀饰物质波之间的联系比人们想象的紧密^[62]。

2011年，A. Tokuno等人讨论了光晶格系统的相位的调制。他们指出一个小的相位调制对玻色子系统来说，可以告诉我们系统的能量吸收率，而对于费米子系统而言，我们可以直接得到系统的电导率^[63]。

2011年，N. Tsuji等人指出，通过周期性的调制外场，光晶格中的费米子系统的相互作用力甚至可以从排斥改变到吸引，从而提供了实验上去模拟超导温度以下的吸引相互作用的哈伯德模型的可能^[64]。

2012年，K. Rapp等人研究了一维的周期性调制相互作用的光晶格中的超冷玻色子气体系统。他们指出，在这种系统中存在丰富的物理现象，甚至当振幅增大到一定程度后会出现成对的超流现象^[65]。

1.4 论文的主要研究内容

前面已经介绍过在调制光晶格方面的一些理论和实验上的进展，但是在解决高维的超光晶格的相边界及临界问题方面，仍然缺乏一个好的解析方法。大家常用的解耦合平均场理论与真实的相边界之间存在较大的差距，而多点强耦合展开方法对于低维问题来说符合的更好，因此第二章的工作主要是发展了一种解析方法-推广的朗道有效势理论，并利用它得到了超光晶格中的相边界，然后比较了它和人们经常用的解耦合平均场方法的优势和劣势。

前人对于超光晶格的研究，主要是停留在一维超光晶格或正方（立方）超光晶格中，而很少涉及阻错的超光晶格。因此，在第三章中，我们研究了阻错超光晶格——包括三角超光晶格和笼壁超光晶格中玻色子系统的量子相变的相图和临界性质，并在其中发现了各向异性的超流态，最后还讨论了在实验上对这种现象的探测问题。

对于周期性调制的光晶格来说，前人的研究主要是集中在AC调制——即周期性的改变光晶格的势场，而另一种新近实现的调制手段——周期性的调制系统的S-波散射长度，则缺乏研究。论文的第四章给出了系统的等效哈密顿量，用各种解析和数值手段研究了系统的相图，并给出了在未来用于研究这种系统的临界性质的方案。

在论文的最后，给出了本论文的总结和对未来的研究工作的展望。

第2章 广义朗道有效势理论及其在超光晶格中玻色子系统的应用

2.1 引言

光晶格中的超冷玻色子的研究近来一直是物理学中的一个热点^[10, 15]。当人们第一次在实验室中实现了光晶格后，人们很快就发现，它搭起了一个从超冷量子气体到凝聚态关联系统的桥梁。随着实验和理论研究的深入，人们把目光投向了更加复杂的系统，包括长程相互作用的系统，多组份的系统以及几何形状上更加有趣的系统，比如超光晶格系统。超光晶格系统作为一种最为简单的调制光晶格系统长期以来受到人们广泛的关注，它是理解更为复杂的空间调制光晶格系统的桥梁。从理论上来说，前面已经有解耦合平均场方法以及多点强耦合展开方法对该系统进行过研究，但是前者是一种平均场方法，与真实的相边界一般相隔甚远，而且在计算临界系统的临界行为时会得到错误的结果；而后者在高维系统时得到的结果也并不精确，因此迫切需要一种在高维系统上表现更好的解析方法。我们把由Santos^[66]发明的朗道有效势理论推广到了多参数的情况，从而得到了一个关于矩阵而不是标量的有效势理论，并把它运用到二维和三维的超光晶格系统中，与数值QMC的模拟结果对比表明，这种推广是正确的，方法具有的精度也很高。

在本章中，我们首先介绍了光晶格中的一些基本的理论概念，这些概念对于理解光晶格和超光晶格中的玻色子系统是很有必要的。然后介绍正方和立方超光晶格的形成以及其哈密顿量。为了得到这种系统的相图，文中将朗道有效势理论做了推广，并计算了超光晶格的相图。最后比较了这种推广的朗道有效势理论方法和解耦合平均场理论的优劣。

2.2 光晶格中玻色子系统的基本理论

在这一节中，我们将会介绍在光晶格中的玻色子系统的一些基本的概念，这些概念对于理解本论文至关重要。本节主要包括光晶格的形成，光晶格中玻色子系统的理论描述，光晶格的参数的调节和光晶格中的玻色子系统的量子相变。

2.2.1 光晶格的形成

光晶格对原子的束缚作用可以用原子和光中的电场的极化作用来解释。在这里我们简单的用谐振子模型来解释一下^[67]。由于光场中的电场的极化作用，原子可以近似的看做是一个极化子谐振子。如果电场可以用 $E(r, t) = \tilde{E}(r)exp(-i\omega t) + c.c.$ ，则由电场激发的极化子可以用 $P(r, t) = \tilde{P}(r)exp(-i\omega t) + c.c.$ ，其中

$$\tilde{P} = \alpha \tilde{E} \quad (2-1)$$

α 是复极化率，它的虚部表示原子对光子的散射。在冷原子的光晶格的实验中，碱金属原子的Bohr半径 r 为 $52 \times 10^{-3}nm$ ，而在实验上所用的激光的波长 λ 通常为几百个 nm ，且 $\lambda \gg r$ ，所以光场对碱金属原子的作用势可以近似的表示为：

$$U_{dip} = \frac{1}{2} \langle P(r, t)E(r, t) \rangle = \frac{1}{2\epsilon c} Re(\alpha)I \quad (2-2)$$

这样光对原子的作用力就可以表示为势能的梯度：

$$F = -\nabla U_{dip} = -\frac{1}{2\epsilon c} Re(\alpha)\nabla I \quad (2-3)$$

谐振子从光场吸收的功率为

$$P_{abs} = \langle \dot{P}(r, t)E(r, t) \rangle = \frac{\omega}{\epsilon c} Im(\alpha)I \quad (2-4)$$

若把光场看成是由一个个的光子组成的源，而对光场的吸收的过程可以看成是光子与原子之间的散射过程^[67]，该散射是由原子先吸收光子，然后自发辐射的过程。这样散射率为

$$\Gamma_{sc} = \frac{P_{abs}}{\hbar\omega} = \frac{1}{\hbar\epsilon c} Im(\alpha)I \quad (2-5)$$

这样就算出了光势阱中最重要的两个量，这两个量取决于光场在空间的光强分布和复极化率 α ，因此剩下的工作就是计算光场的极化率 α 了，它是光场的频率 ω 的函数。

我们采用洛伦兹的经典模型来计算，在此模型中，电子可以看成是一个相对于正电荷中心的束缚谐振子，固有频率为 ω_0 ，我们可以通过电子的运动方程 $\ddot{x} + \dot{x} + \omega_0^2 x = -eE(t)/m_e$ 来得到极化率

$$\alpha = \frac{e^2}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_\omega} \quad (2-6)$$

其中 Γ_ω 的表达式为：

$$\Gamma_\omega = \frac{e^2\omega^2}{6\pi\epsilon m_e c^3} \quad (2-7)$$

如果定义共振阻尼率为 $\Gamma = (\omega_0/\omega)^2\Gamma_\omega$, 则极化率可以写成^[67]

$$\alpha = 6\pi\epsilon c^3 \frac{\Gamma/\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_\omega} \quad (2-8)$$

当然以上的计算基于经典模型的, 一般的教科书上关于原子和光场相互作用的计算是把原子看成是二能级原子系统, 但是得到的极化率的表达式仍然与式2-8相同, 不同的只是考虑量子效应之后, 系统存在一种饱和效应, 即当光场的强度太大时, 会有大量的原子处于激发态, 这样上面的结论就不成立, 但是实验上我们仅仅对饱和度非常低的情况感兴趣, 因此式2-8对极化率的描写符合的非常好^[67]。定义频移量为 $\Delta \equiv \omega - \omega_0$, 通常我们仅仅关注 $\Delta \ll \omega_0$ 的情况, 在这种情况下, 我们可以得到:

$$U_{dip}(r) = \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_0^3 \Delta} I(r) \quad (2-9)$$

和

$$\Gamma_{sc} = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\Delta}\right)^2 I \quad (2-10)$$

远频移低饱和的光场对原子的相互作用可用上面两式来理解。通过上面两式, 可以得到两个非常重要的信息。一是光场对原子的作用可分为两大类, 一类是 $\Delta < 0$, 被称为红移调制, 此时原子在光场中的势能为负, 即光场对原子的作用力为吸引力, 原子被限制在光场的极小处; 另一类是 $\Delta > 0$, 被称为蓝移调制, 此时原子被限制在光场的极大处。二是光势阱跟 I/Δ 成正比, 而散射率和 I/Δ^2 成正比, 所以当光晶格的势阱深度 U_{dip} 一定时, 可以通过同时增大光场的光强和频移减小粒子的散射率^[67]。

当两束频率相同的激光在空中相反方向传播时, 就会在空间干涉形成光强周期性变化的驻波, 这种驻波就是光晶格。当然要把原子束缚在光晶格中, 原子的动能必须足够小^[68], 然后绝热的开启激光场, 将原子限制在光晶格中。

所以要实现将冷原子限制在光晶格中, 第一步就是实现原子的玻色-爱因斯坦凝聚(BEC)。爱因斯坦在1924年指出, 自由玻色子系统在临界温度 T_c 以下, 会有宏观可见的量的玻色子聚集在系统的基态, 这种行为被称为凝聚在基态。直到1995年, 由于激光制冷技术的实现, 才使得人类第一次在实验室将碱金属原子 Rb 降到了临界温度以下^[7, 20], 从而观察到了BEC现象。

在三维的情况下, 临界温度的表达式为:

$$T_c = (\rho/2.61)^{2/3} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\right) \quad (2-11)$$

其中 ρ 为系统的原子数密度, m 为原子的质量。可见临界温度与粒子的质量成反

比，与数密度的 $2/3$ 次方成正比。要实现碱原子的玻色-爱因斯坦凝聚，温度必须降低到纳开级别，这个时候原子的动能很小，就可以在较长的时间内被限制在光晶格系统中。一般来说，人们会在光晶格外引入一个附加的磁势阱来增加对原子的束缚。

2.2.2 光晶格中玻色子系统的哈密顿量

我们以一维的光晶格为例，有关更加复杂的光晶格的问题可以根据以下所说明的做推广。因为光晶格是一种周期性的晶格，根据布洛赫原理^[69]，系统的哈密顿量的波函数必然满足：

$$\Psi_{n,q}(r) = e^{iqr} u_{n,q}(r) \quad (2-12)$$

其中 $u_{n,q}(r) = u_{n,q}(r + a_x)$ ， a_x 为系统的晶格常数， q 是布洛赫原理引入的一个新的量子数，被称为赝动量，实际它反应的是系统的周期性结构。根据上式我们可以得到：

$$\Psi_{n,q}(r + a_x) = e^{iq a_x} \Psi_{n,q}(r) \quad (2-13)$$

由于上式成立，所以布洛赫函数总是能够写成平面波形式的傅里叶变换形式：

$$\Psi_{n,q}(r) = \sum_j e^{iq j a_x} w_n(r - j a_x) \quad (2-14)$$

$w_n(r - j a_x)$ 就被称为瓦尼尔函数。所有的瓦尼尔函数组成了一组正交的基底，我们可以在这套基底的基础上来描述多粒子系统的问题。由于布洛赫函数可以视为是在赝动量空间来描述系统，因此它的傅里叶变换-瓦尼尔函数可以视为是在实空间来描述多体系统。由式（2-14）可得以 x 为中心的瓦尼尔函数为：

$$w_n(r - x) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} dq e^{-iqx} \Psi_{n,q}(r) \quad (2-15)$$

上式中 BZ 的意思是第一布里渊区， V 表示系统一个晶胞的体积。

在外场 $V(r)$ 中运动的相互作用为 V_{int} 的多粒子系统的哈密顿量可以写为

$$\hat{H} = \int d^3r \Psi^\dagger(r) \left[-\frac{\hbar\Delta^2}{2m} + V(r) - \mu \right] \Psi(r) + \frac{1}{2} \int \int d^3r_1 d^3r_2 \Psi^\dagger(r_1) \Psi^\dagger(r_2) V_{int} \psi(r_1) \psi(r_2) \quad (2-16)$$

上式中的 Ψ^\dagger 和 Ψ 分别是玻色场的产生和湮灭算符^[81]。它们满足下列关系：

$$[\Psi(r), \Psi^\dagger(r')] = \delta(r - r') \quad [\Psi(r), \Psi(r')] = 0 \quad [\Psi^\dagger(r), \Psi^\dagger(r')] = 0 \quad (2-17)$$

在低温和低密度的情况下，我们仅仅考虑粒子之间的两体的接触相互作用，在这种近似下，我们可以将粒子之间的相互作用表示为：

$$V_{int}(r_1, r_2) = \frac{4\pi a_{BB}\hbar^2}{m}\delta(r_1 - r_2) \quad (2-18)$$

其中 a_{BB} 是s波散射长度，在实验上可以通过Feshbach共振^[73]来调节它的大小，从而控制粒子之间的相互作用的大小。这样我们可以得到新的哈密顿量：

$$\hat{H} = \int d^3r \left[\Psi^\dagger(r) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} + V(r) - \mu' \right] \Psi(r) + \frac{g}{2} d^3r_1 d^3r_2 \Psi^\dagger(r) \Psi^\dagger(r) \psi(r) \psi(r) \right] \quad (2-19)$$

现在我们将上式重新表述在以瓦尼尔函数为基底的表象中，由于温度足够低，只考虑最低能带的瓦尼尔函数，可以得到：

$$\Psi(r) = \sum_i \hat{a}_i w(r - r_i) \quad (2-20)$$

$$\Psi^\dagger(r) = \sum_i \hat{a}_i^\dagger w^*(r - r_i) \quad (2-21)$$

将上式带入到式(2-19)中，仅考虑相邻格点之间的跃迁，可以得到系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + U/2 \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (2-22)$$

这就是玻色-哈伯德模型。其中各参数的表达式为：

$$J = \int d^3r w^*(r - r_i) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} + V(r) \right] w(r - r_j) \quad (2-23)$$

$$U = g \int d^3r |w(r)|^4 \quad (2-24)$$

$$\mu = \mu' - \int d^3r w^*(r) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} + V(r) \right] w(r) \quad (2-25)$$

该模型中 J 表示相邻格点之间的跃迁振幅， U 表示同一格点之间的粒子的两体相互作用力的大小， μ 表示系统的有效化学势。

2.2.3 实验上对光晶格中玻色子哈密顿量中各参数的调节

光晶格系统之所以会激起人们广泛的兴趣的一个重要的原因是它的全参数是可以很容易的在实验上来调节的，而且可以很精确的调节，这不仅使它的实验结果很容易和理论上作比较，而且在量子计算等领域有很多的作用。一般来说，实验上对光晶格系统的调节有两种方法，一种是通过调节干涉的激光的强度从而调节光晶格的深度，另一种是调节系统的Feshbach共振的S波散射长度来调节格点上粒子的相互作用。

由上面的式子2-25可知，为了使玻色哈伯德模型中的各种物理量和实验室中的物理量对应起来，需要计算系统的瓦尼尔函数。下面，我们重复文献[8]中的过程来详细介绍怎样计算一维系统的瓦尼尔函数。系统的布洛赫函数

是满足薛定谔方程的

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\Psi_k^{(n)}(r) = E_k^{(n)}\Psi_k^{(n)}(r) \quad (2-26)$$

而由于势场 $V(r)$ 具有周期性，因此波函数可以写成

$$\Psi_k^{(n)}(r) = e^{ikr}\Phi_k^{(n)}(r) \quad (2-27)$$

而在上式中 $\Phi_k^{(n)}(r)$ 和势场具有相同的周期性。在很多情况下，系统的势能 V 很大以至于粒子基本上就是被限制在各个格点上，而相邻格点之间的跃迁靠的是隧穿效应。在这种情况下，可以定义另一组以各个格点为中心的另一套基底就是瓦尼尔函数

$$u^n(r - r_i) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{-ikr_i} \Psi_k^{(n)}(r) \quad (2-28)$$

在上式中， N_s 是系统的总格点数， r_i 是第 i 个格点的位置，而对 k 的求和遍及整个第一布里渊区。可以验证，由上式所定义的瓦尼尔函数满足正交性和完备性定理，因此是一组很好的基底。如果我们定义

$$r' = \frac{r}{E_R} \quad k' = \frac{k}{E_R} \quad V'_0 = \frac{V_0}{E_R} \quad \varepsilon^n = \frac{E^n}{E_R} \quad (2-29)$$

在上式中， E_R 是系统的回冲能量，定义为

$$E_R = \frac{\hbar^2 k_L^2}{2m} \quad (2-30)$$

上式中的 k_L 是系统的波矢，这样的话可以把薛定谔方程写为：

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r'^2} + V'_0 \sin^2(r')\right]\Psi_{k'}^n(r') = \varepsilon_{k'}^n \Psi_{k'}^n(r') \quad (2-31)$$

把布洛赫关系式代入可得：

$$\left[k'^2 - 2ik' \frac{\partial}{\partial r'} - \frac{\partial^2}{\partial r'^2} + V'_0 \sin^2(r')\right]\Phi_{k'}^n(r') = \varepsilon_{k'}^n \Phi_{k'}^n(r') \quad (2-32)$$

由于布洛赫函数具有周期性，因此可以对其进行傅里叶展开

$$\Phi_{k'}^n(r') = \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_{k',l}^n e^{2ilr'} \quad (2-33)$$

这样就可以将对 $\Phi_{k'}^n(r')$ 的计算转化成对系数 $c_{k',l}^n$ 的计算，我们要求等式两边的傅里叶的系数都相等，由此可以得到表达式

$$\left[(k' + 2l)^2 + \frac{V'_0}{2}\right]c_{k',l}^n + \frac{V'_0}{4}(c_{k',l+1}^n + c_{k',l-1}^n) = \varepsilon_{k'}^n c_{k',l}^n \quad (2-34)$$

上式可以理解为是一个无穷阶矩阵的本征值问题，如果对系数 $c_{k',l}^n$ 取一个截断，比如限制 l 为某一个具体的值，那么无穷阶矩阵就转化为一个有限阶的矩阵，该矩阵的特征值可以很容易的被数值求解。如图 2-1所示在 $V'_0 = 15$ 的时候的瓦尼

尔函数的示意图，可以发现，在这个时候，瓦尼尔函数在格点上的局域性非常的好。计算出了瓦尼尔函数之后，就可以计算哈伯德模型的各个物理量。由于

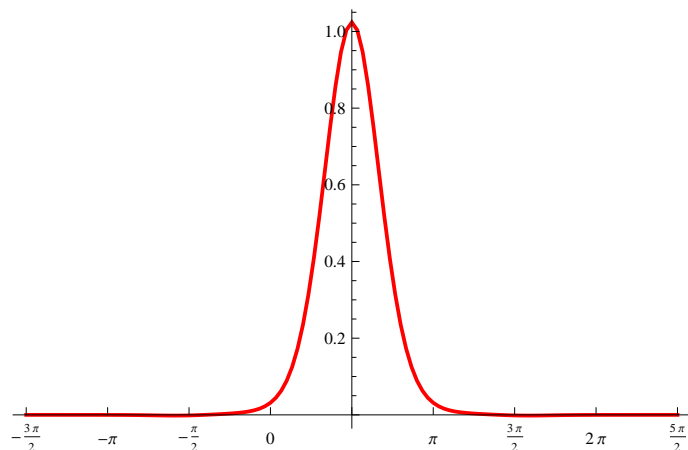
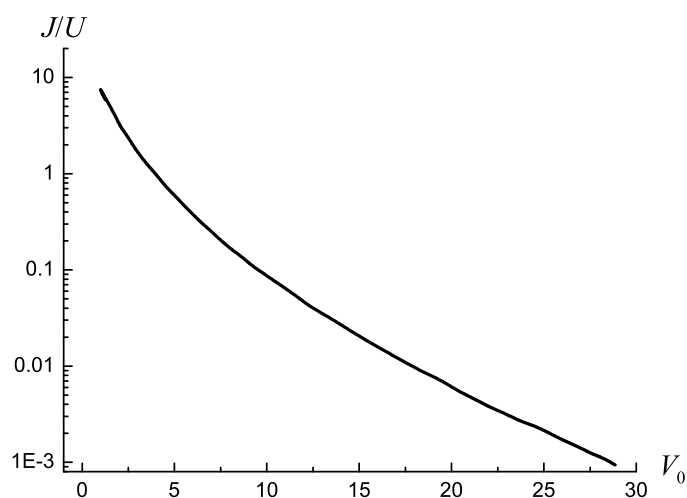


图 2-1 瓦尼尔函数

Fig.2-1 Wannier function

在实际的研究之中，最关注的是系统的跃迁振幅和点上的两体相互作用的相对变化，这里，我们只给出 J/U 相对于格点深度 V_0' 的变化，如图 2-2所示：在光晶

图 2-2 J/U 相对于格点势能 V_0' 的变化^[72]Fig.2-2 Change of J/U relative to V_0' ^[72]

格中，当通过改变干涉光的强度来改变系统的格点深度的时候，值 J/U 就会随之改变。但要实现系统全参数的自由调节，还需要一种可以单独改变 J 、 U 中某一个值的实验方法。而Feshbach共振提供了这样一种单独来改变系统的格点上粒子相互作用的一种方法。除了最近邻格点之间的跃迁之外，其实还存在次近邻格点之间的跃迁，但是A. Hoffmann指出，次近邻格点之间的跃迁会远远的

小于近邻格点之间的跃迁，比如在格点深度 $V = 10E_R$ 时，次近邻格点之间的跃迁强度只有近邻格点的0.012，因此我们可以忽略^[72]。

Feshbach共振是一个非常有效的调节手段，它可以将系统中粒子之间的相互作用势能从负无穷调节到正无穷，正是有了这个手段，系统可以很容易的达到强耦合的区域。如图中所示，在Feshbach共振的时候，一个分子的束缚态与一个两粒子的散射态相互耦合。如图 2-3中(b)所示， V_{bg} 表示开通道，代表的是两个粒子的散射的势能；而 V_c 表示闭通道，代表的是束缚态的能量，Feshbach共振发生在当闭通道逐渐接近开通道的时候，而这是因为 E_c 的变化。由于赛曼效应，能量差 E_c 取决于外磁场 B 。由此得到的S-波散射长度为

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta'}{B - B_0} \right) \quad (2-35)$$

上式中 a_{bg} 是系统的背景散射长度 (V_{bg} 的散射长度)， B_0 是Feshbach共振点，而 Δ' 是共振的宽度。

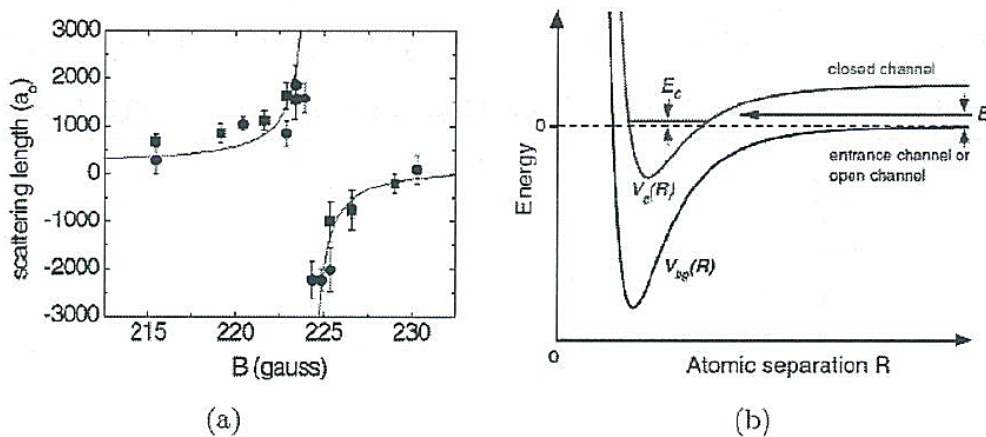


图 2-3 Feshbach共振原理图^[4]

Fig.2-3 Principle of Feshbach resonance^[4]

2.2.4 光晶格中玻色子系统的量子相变

一个热力学系统的状态通常取决于某些宏观的物理量，比如温度，压强，体积等。当这些宏观物理量取某个特定值时，系统处在某一个特定的相。如果调节这些参数，使得系统从一个相变化到另一相，那么就称系统发生了相变。系统发生相变的时候，宏观性质往往会产生剧烈的变化。典型的相变有固体，液体，气体之间的相变。人们还发现，各种不同的物质的临界行为具有普遍性。这种普遍性通常可以用一种代数方程来描述^[4]，即 $X \propto (T - T_c)^\sigma$ ，这里的 σ

就叫做临界指数，通常临界指数具有普遍性，而临界指数相同的相变通常归结为一类。与普通的系统所发生的由温度驱动的相变不同，对于光晶格中的玻色子来说，可以由于量子涨落而发生量子相变。量子相变是指在绝对零度下，通过改变系统的物理参数来实现的相变，它表明系统的基态发生了突变。在光晶格中，会发生从莫特绝缘态到超流态的相变。从系统的哈密顿量(2-22)可以看出，系统的格点上的相互作用势能 U 和系统的相邻格点之间的跃迁振幅 J 存在一种相互竞争的关系，当 U/J 趋向于无穷大时，系统的粒子都停留在各自的格点上，格点之间不存在相互跃迁作用，这时，系统处在完全的莫特绝缘态，而当 U/J 的值趋向于零时，系统的每一个原子都可以在格点间自由跃迁，此时每个原子出现在各个格点上的概率都相等，系统处在完全的超流态。所以当 U/J 的值逐渐的减小的时候，系统会发生从莫特绝缘态到超流态的相变。

这种从莫特绝缘态到超流态的相变是一种连续相变。对于连续相变来说，系统的临界行为通常不取决于具体的哈密顿量，而是和系统的具体维度和序参量的个数有关^[78]。由于 n 维的量子相变相当于 $n+1$ 维的经典相变^[9]，因此可以预计，普通的玻色哈伯德模型的临界指数与 $n+1$ 维的 $X-Y$ 模型的临界指数相同。而且根据重整化的理论，系统的六个临界指数不是独立的，只需要计算出其中的任意两个就可以通过关系得到其他的四个，因此，对于玻色-哈伯德系统来说，如果我们能计算系统的凝聚密度和超流密度的临界行为，就能知道系统的临界的各个参数。

2.3 超光晶格的形成及系统哈密顿量

二维的正方晶格和三维的立方晶格在实验上是很容易实现的。首先用波长为 λ 的一组光形成立方(正方)晶格，然后再用一组波长为 2λ 的光形成另一组立方(正方)晶格，这样两套晶格在空间上的叠加，就会形成一套超立方(正方)晶格，比如，在实验上可以选择 $532nm$ 和 $1064nm$ 的两套激光来形成这种超光晶格。如图2-4所示，这种正方光晶格可以分成两套子系统来理解，其中子系统 A 中的晶格比子系统 B 中的晶格要深 $\Delta\mu$ 。

如果只考虑粒子之间的相互接触作用，那么系统的哈密顿量可以表示为

$$\hat{H} = \int d^3r \left[\Psi^\dagger(r) \left[-\frac{\hbar\Delta^2}{2m} + V(r) - \mu' \right] \Psi(r) + \frac{g}{2} d^3r_1 d^3r_2 \Psi^\dagger(r) \Psi^\dagger(r) \psi(r) \psi(r) \right] \quad (2-36)$$

上式中的算符 Ψ 仍然满足玻色子算符的基本关系。假设子系统 A 的瓦尼尔函数 u 和子系统 B 的瓦尼尔函数 w 依然正交，则玻色子算符可以写为

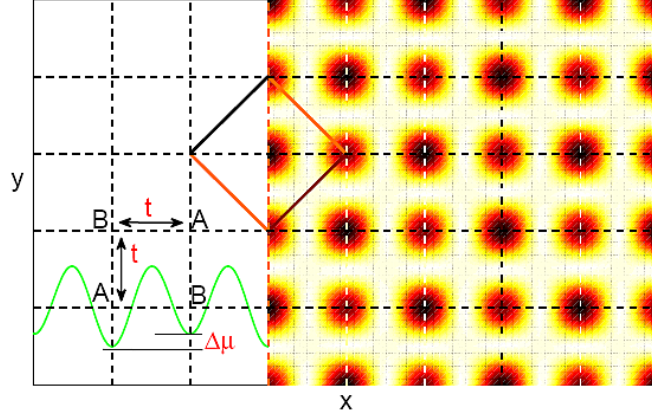


图 2-4 正方超光晶格系统

Fig.2-4 Square Superlattice System

$$\Psi(r) = \sum_i \hat{a}_i u(r - r_i) + \sum_j \hat{a}_j w(r - r_j) \quad (2-37)$$

$$\Psi^\dagger(r) = \sum_i \hat{a}_i^\dagger u^*(r - r_i) + \sum_j \hat{a}_j^\dagger w^*(r - r_j) \quad (2-38)$$

上式中 i 表示子系统A中的格点，而 j 表示子系统B中的格点。将上式带入到式2-36中并运用瓦尼尔函数的正交性可以得到系统的各个参数的表达式：

$$J_{AB} = \int d^3r u^*(r - r_i) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} + V(r) \right] w(r - r_j) \quad (2-39)$$

$$J_{BA} = \int d^3r w^*(r - r_j) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} + V(r) \right] u(r - r_i) \quad (2-40)$$

$$U_A = g \int d^3r |u(r)|^4 \quad (2-41)$$

$$U_B = g \int d^3r |w(r)|^4 \quad (2-42)$$

$$\mu_A = \mu' - \int d^3r u^*(r) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} + V(r) \right] u(r) \quad (2-43)$$

$$\mu_B = \mu' - \int d^3r w^*(r) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} + V(r) \right] w(r) \quad (2-44)$$

$$\Delta\mu = \mu_A - \mu_B \quad (2-45)$$

如果要得到二次量子化之后的哈密顿量，显然需要去计算瓦尼尔函数 u 和 w 。而随后我们发现，对于 u 和 w 的计算并不是一个简单的问题。

回顾一下瓦尼尔函数的定义，我们发现，由于系统的外场具有周期性的势能，因此可以把系统的波函数做傅里叶变换，从而得到每一个格点上的瓦尼尔函数的表达式，但是在超光晶格中，系统的周期性不再是一个格点，而是一个晶胞。因此只能找到系统的晶胞的瓦尼尔函数，因此上面的表述中子系统A和子系统B的瓦尼尔函数是不准确的，但是由于超光晶格的对平移对称性的破坏，因此也会将原系统的最低的能带撕裂成两个能带，此时需要考虑最低的两个能

带，而不是一个能带。因此，理想的情况为，如果晶胞的最低能带的瓦尼尔函数仅仅局域在子系统A的格点上，而第二能带的瓦尼尔函数局域在B的格点上，则上述的计算仍然是成立的。但是寻找这种带条件的最局域的瓦尼尔函数仍然是一件很困难的事情。给定一组布洛赫轨道函数 $u_{n,q}(r)$ ，另一组等价的布洛赫轨道函数可以通过如下变换

$$u_{n,q}(r) \rightarrow e^{i\phi_n(q)} u_{n,q}(r) \quad (2-46)$$

得到，其中 $\phi_n(q)$ 是 q 的实函数。 $\phi_n(q)$ 的选择是非常重要的，比如选择 $\phi_n(q) = 0$ 时，得到的瓦尼尔函数如图2-5所示，它显然不符合我们的要求，因此，怎样去选择 $\phi_n(q)$ 还需要更多的思考。

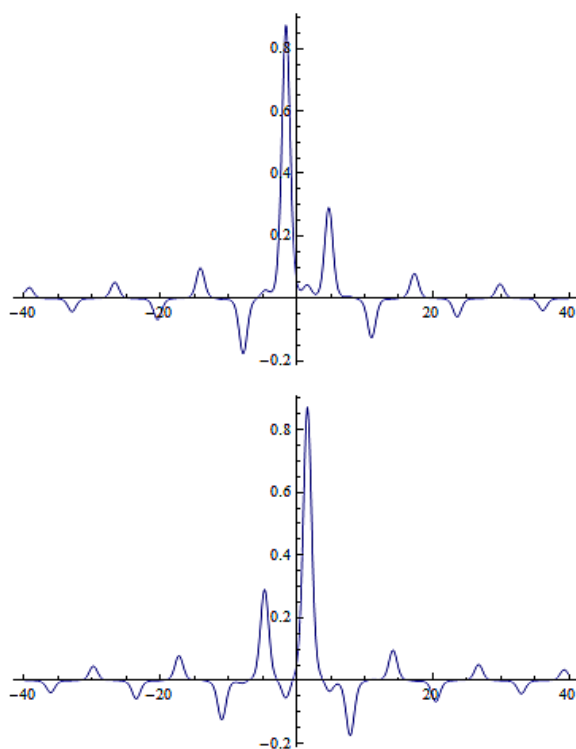


图 2-5 $\phi_n(q) = 0$ 时的瓦尼尔函数

Fig.2-5 Wannier function of superlattice system when $\phi_n(q) = 0$

另一种可能的思路为用高斯函数近似的代替系统的瓦尼尔函数，比如在考虑子系统A时，暂且忽略子系统B的差异的影响，这样也可以分别求得子系统A, B的瓦尼尔函数，这就是所谓的紧束缚近似。在这种近似下，将每个格点当做是一个二次项的简谐势，并且用它们的基态波函数来近似的代替系统的瓦尼尔函数。这种近似在求系统的势能和化学势的时候符合的很好，而在求系统

的跃迁振幅的时候有较大的偏差。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (V_0 + \Delta V) k_L^2 x^2 \right] u(x) = \varepsilon u(x) \quad (2-47)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 k_L^2 x^2 \right] w(x) = \varepsilon w(x) \quad (2-48)$$

上式中的 ΔV 是子系统A和子系统B的格点深度的势能差。由上面的式子我们可以求得，

$$u(x) = \sqrt[4]{\frac{\pi \sqrt{V'_0 + \Delta V}}{a^2}} \exp \left[-\frac{\pi^2 \sqrt{V'_0 + \Delta V}}{2a} \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right] \quad (2-49)$$

$$w(x) = \sqrt[4]{\frac{\pi \sqrt{V'_0}}{a^2}} \exp \left[-\frac{\pi^2 \sqrt{V'_0}}{2a} \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right] \quad (2-50)$$

据此可以计算我们感兴趣的 U_A 和 U_B 的相对差 ΔU ，

$$\Delta U = \frac{(V'_0 + \Delta V)^{3/4} - (V'_0)^{3/4}}{(V'_0)^{3/4}} \quad (2-51)$$

以及化学势的相对差 $\Delta\mu$

$$\Delta\mu = \frac{\Delta V + 3 \sqrt{V'_0 + \Delta V} - 3 \sqrt{V'_0}}{(V'_0)^{3/4}} \quad (2-52)$$

上面的式子只有在格点的深度比较深的时候才近似的成立，因此我们假设格点的深度为 $V'_0 = 15$ ，于是可以得到如图 2-6所示的A子系统和B子系统的化学势之差和格点上的排斥势能之差。从图中我们可以看到，化学势之差比格点上的排斥势能之差要大得多，因此可以忽略格点上的排斥势能之差。

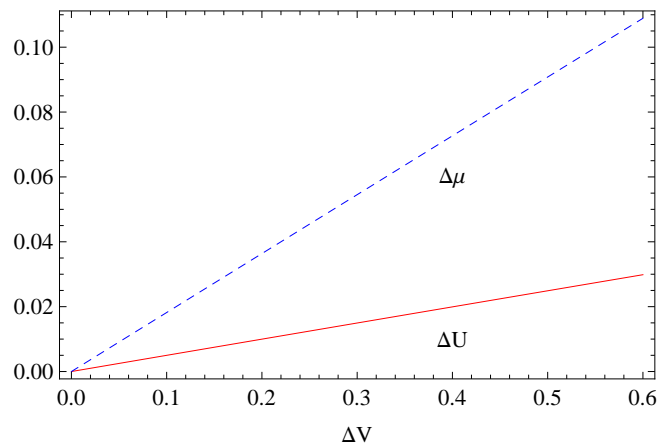


图 2-6 子系统A和B的化学势之差和排斥势能之差

Fig.2-6 Difference of the chemical potential and on-site repulsive potential between subsystem A and

B

如果只考虑格点上的相互作用和最近邻格点之间的跃迁，那么系统二次量子化之后的哈密顿量可以写为

$$\hat{H}_{\text{SL}} = -t \sum_{\langle j \in A, j' \in B \rangle} (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} + \hat{a}_j \hat{a}_{j'}^\dagger) + \frac{U}{2} \sum_{j \in A, B} \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) - (\mu + \Delta\mu) \sum_{j \in A} \hat{n}_j - \mu \sum_{j \in B} \hat{n}_j \quad (2-53)$$

上式中的 $\Delta\mu$ 是子系统A中的格点上附加的化学势，能这样描述是因为子系统A和B中的格点深度差对比格点深度来说是一个很小的量。当然，目前我们只探索了在光晶格精度很深（紧束缚近似成立的时候）的情况，对于一般的情况，需要计算对每个格点最局域的瓦尼尔函数，这在未来仍然是个很值得研究的课题。

在找到系统的哈密顿量后，就可以来着手计算系统的量子相变的相图。但是过往的解析方法在计算超光晶格的相图时，都存在这样活那样的缺陷，解耦合平均场理论与实际的相边界相隔甚远，多点强耦合展开方法在高维问题上存在较大的误差，而在高维问题上符合的很好的朗道有效势理论又很难解决这种复杂的系统的问题。因此，在下一节中，我们主要是对这种朗道有效势理论进行推广，以使它能解决多子系统的问题。

2.4 广义朗道有效势理论

为了计算像超光晶格这种由多个耦合的子系统所组成的复杂系统的相图，我们把朗道有效势理论推广到多参数的情况。但是，在本节中，首先简要的介绍了朗道关于相变的描述，即朗道对称破缺理论，因为这是整个有效势理论的基础。

2.4.1 朗道对称破缺理论

朗道最先指出，相变通常伴随着系统的对称性的改变。比如液体具有连续的旋转对称和平移对称，而固体态没有，通常称这种现象为对称破缺。因此，人们往往用一个序参量来描述系统的相变，在系统的无序相，序参量为零，而在有序相，系统的序参量不为零，如图 2-7所示。而描述系统的哈密顿量通常在很多不同的操作下具有对称性，在无序相，系统的哈密顿量的基态通常和哈密顿量具有相同的对称性，而在有序态，基态的对称性通常低于系统的哈密顿量。

如果定义系统的自由能为 F ，则可以将系统的相变根据 F 的导数的阶数进行分类。大体来说，可以将系统的相变分为两类，如果自由能的一阶导数在相

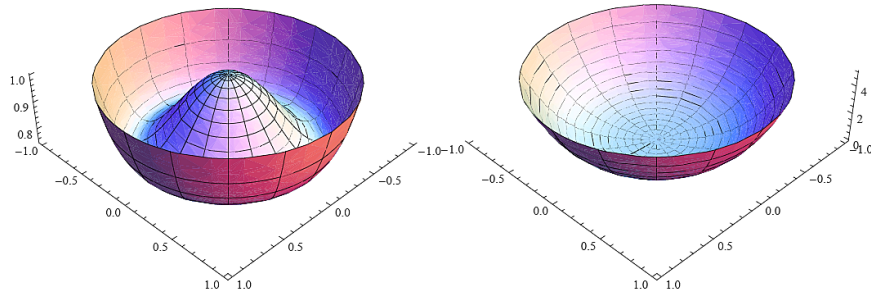

 图 2-7 系统的对称破缺^[8]

 Fig. 2-7 Symmetry breaking of the system^[8]

变点处连续，则称之为连续相变，一阶导数不连续的，称之为不连续相变（一级相变）。如图 2-8 所示，无论是对于一级相变还是对于二级相变来说，系统的自由能都是连续的，但是对于自由能的一阶导数 $S = -\partial F/\partial T$ 就只有连续相变的时候才是连续的。

必须指出，相变发生在系统出现非解析的奇异点的时候，而这只会出现在热力学极限的情况下。所谓的热力学极限是指系统的粒子数 N 和 V 都趋于无穷，但是 N/V 趋于一个有限值。前面说过朗道通过引入一个序参量来描述相变。通常序参量的形式为 $\Psi = (\psi_1(x), \dots, \psi_N(x))$ ，每一个分量 $\psi_i(x)$ 都是一个标量。由于序参量在相变点附近是一个小量，即 $|\Psi|$ 远小于一，因此可以将自由能对序参量进行展开。由于系统是自发的对称破缺，因此在不引入外场的情况下任何有限值的 $|\Psi|$ 都不能使自由能最小，这种情况下，给 Ψ 任何一个角度的转动，都不会影响系统的自由能，因此自由能的展开项中只包含 $|\Psi|$ 的偶次项。如果忽略系统的序参量的空间涨落，则可以得到

$$F(\Psi) = a_0 + a_2\Psi^2 + a_4\Psi^4 + a_6\Psi^6 - \eta\Psi \quad (2-54)$$

上式中的 η 表示外场的大小。为了方便起见，取外场 η 和 a_0 都为零。然后我们来分析系统的自由能在不同的参数情况下的最小值。如果所有的系数都是正的，那么只有在 $\Psi = 0$ 的时候系统取最小值。

对于连续相变来说，系数 a_4 为正，在这种情况下，考虑 a_6 不会对系统的最小值产生本质的改变。因此，在分析连续相变时，只考虑系数 a_2 和 a_4 。当 a_2 从正变为负的时候，一种非零的新的最小值对应的序参量会出现，其值为：

$$|\Psi| = \sqrt{\frac{-a_2}{2a_4}} \quad (2-55)$$

而对于不连续相变来说，系数 a_4 小于零，而 a_6 大于零。对于系统的自由能函数求极值，可能会有三个解，除了 $|\Psi| = 0$ 之外，在一定条件下还有两个解

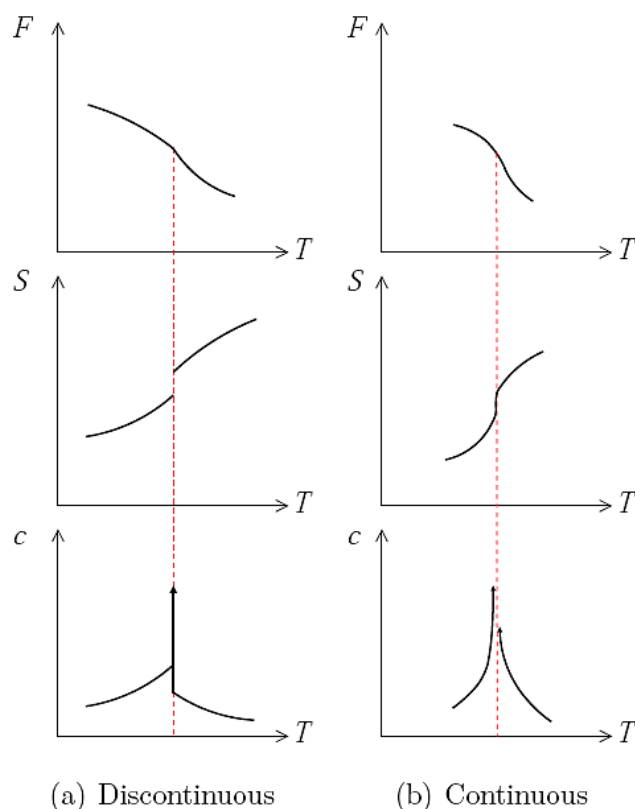

 图 2-8 连续相变和不连续相变系统参数对比^[4]

 Fig.2-8 Several parameters of the discontinues and continues phase transition^[4]

$$|\Psi^+| = \sqrt{\frac{-a_4 + \sqrt{a_4^2 - 3a_2a_6}}{3a_6}}, \quad |\Psi^+| = \sqrt{\frac{-a_4 - \sqrt{a_4^2 - 3a_2a_6}}{3a_6}} \quad (2-56)$$

如果解 $|\Psi^+|$ 对应着系统的自由能的最小值的话，那么就表明系统发生了相变。图 2-9 中，我们可以清楚的看到两种相变的自由能和序参量变化的区别，在连续相变的时候，序参量是连续变化的，而在非连续相变的时候，序参量有一个跳跃，在连续相变时，发生相变的时候， $|\Psi| = 0$ 对应的点不再是极小值，而在非连续相变的时候，自由能在相变时在 $|\Psi| = 0$ 时仍然是极小值，但是不是最小值，因此系统的序参量会产生跳跃。

我们所要关注的从莫特绝缘态到超流态的相变就是一种连续相变，根据上面的描述，相变发生在二阶系数 a_2 由正变负的时候。在下一节中将介绍怎样计算光晶格中的玻色子系统的自由能和有效势。

2.4.2 光晶格中玻色子的朗道有效势理论

前面简要的介绍过描述光晶格中玻色子的模型——玻色-哈伯德模型（2-

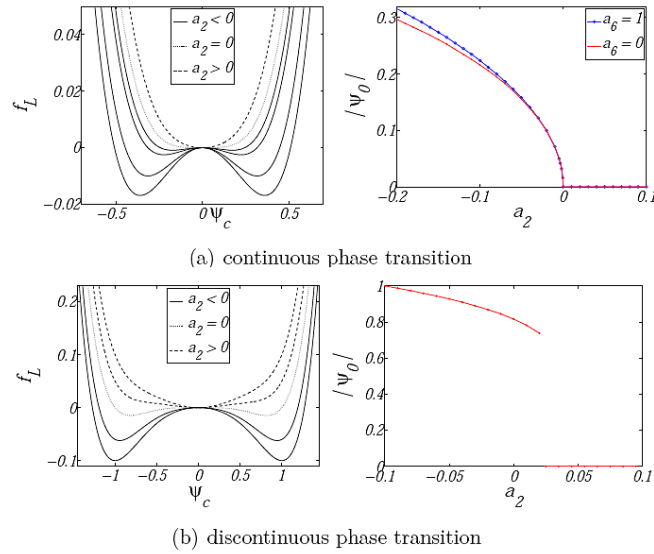

 图 2-9 连续相变和不连续相变系统自由能和序参量的变化^[4]

 Fig.2-9 Change of the free energy and order parameter of the discontinues and continues phase transition^[4]

22)。在1989年，M. P. A. Fisher用平均场的方法对该模型做出了深刻的研究^[9]，指出该模型中存在从莫特绝缘体到超流态的相变，这一预言后来得到了实验的证实^[10]。为了在理论上更好的研究该相变及其临界性质，Santos等人在2009年提出了光晶格中的金兹堡-朗道理论^[66]，后来Dennis等人将其发展到高阶^[75, 76]，与QMC等数值结果的高度重合性证明了这种方法的有效性，并且该方法有希望可以处理高维系统的临界动力学问题。在这一节，我们简要的介绍一下零温时的光晶格中的朗道有效势理论。

为了描述这种从莫特绝缘态到超流态的二阶相变，我们运用在场论中用来描述热力学相变的方法来描述这种量子相变。首先引入和产生湮灭算符耦合的流，得到一个含流的哈密顿量：

$$\hat{H}_{\text{BH}}(J, J^*) = \hat{H}_{\text{BH}} + \sum_j (J\hat{a}_j^\dagger + J^*\hat{a}_j) \quad (2-57)$$

从莫特态到超流态的相变的定义为序参量 $\psi = \langle \hat{a}_i \rangle$ 变为非零。系统的自由能可以写为：

$$F(J, J^*) = -\frac{1}{\beta} \ln [\text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_{\text{BH}}(J, J^*)}] \quad (2-58)$$

这样可以得到序参量与自由能之间的关系

$$\psi = \frac{1}{N_s} \frac{\partial F(J, J^*)}{\partial J^*}, \quad \psi^* = \frac{1}{N_s} \frac{\partial F(J, J^*)}{\partial J} \quad (2-59)$$

上式中 N_s 表示系统的格点数，式（2-59）告诉我们可以对自由能做勒让德变换

得到系统的有效势，该有效势在朗道理论中有非常重要的作用

$$\Gamma(\psi, \psi^*) = F/N_s - \psi^* J - \psi J^* \quad (2-60)$$

从勒让德变换的表达式可以看出，引入的外源项可以通过对有效势求导得到：

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial \psi^*} = -J, \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial \psi} = -J^* \quad (2-61)$$

在外源项 $J = J^* = 0$ 时，含流的哈密顿量回归到原来系统的哈密顿量。在这种极限下，系统的有效势和自由能也是等价的，并且，式 (2-61) 也表明系统的序参量遵从的规律为使系统的有效势处于最低值的状态。系统有效势的极小值对应着 $\psi = 0$ 表明系统处于莫特态，而对应着 $\psi \neq 0$ 则表明系统处于超流态。

在零温的时候，自由能就是基态能量，可以通过瑞利-薛定谔微扰表达式对跃迁项和流分别进行展开，由于玻色-哈伯德模型具有 $U(1)$ 对称性，因此只有偶次项被保留

$$F(J, J^*, t) = N_s \left(F_0(t) + \sum_{p=1}^{\infty} c_{2p}(t) |J|^{2p} \right) \quad (2-62)$$

这其中的展开系数可以通过进一步对跃迁项的展开来得到

$$c_{2p}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-t)^{2n} \alpha_{2p}^{(n)} \quad (2-63)$$

由式 (2-59), (2-61), 和 (2-62) 可以得到系统的有效势的微扰表达式

$$\Gamma(\psi, \psi^*, t) = F_0(t) - \frac{1}{c_2(t)} |\psi|^2 + \frac{c_4(t)}{c_2(t)^4} |\psi|^4 + \dots \quad (2-64)$$

根据二阶相变的朗道理论，从莫特态到超流态的相边界可以通过将有效势 (2-64) 展开的二阶系数设为零。为了解方程 $1/c_2(t_c) = 0$ ，我们将它对跃迁项进行展开得到

$$\frac{1}{c_2(t)} = \frac{1}{\alpha_2^{(0)}} \left(1 + \frac{\alpha_2^{(1)}}{\alpha_2^{(0)}} t + \left[\left(\frac{\alpha_2^{(1)}}{\alpha_2^{(0)}} \right)^2 - \frac{\alpha_2^{(2)}}{\alpha_2^{(0)}} \right] t^2 + \dots \right) \quad (2-65)$$

上式给了有关相边界条件的代数表达式。上式中解的个数和所考虑的跃迁项的阶数有关，通常只有最小的正实数解才被人为是真实的边界条件。

2.4.3 多参数的朗道有效势理论

如同在第一章简介中所说的那样，有效势朗道理论在计算单参数的格点系统的时候取得了很大的成功^[79-82]。但是随着理论和实验的发展，越来越多的系统开始需要引入多个参数才能描述，于是我们在下一节将这种方法推广到多参数的系统当中。

为了描述一个多参数的系统，比如超光晶格，需要引入多个自由度，比如，对系统的某个晶胞标示为 j ，晶胞中含有 m 个格点，分别被标示为 $1, 2, \dots, m$ ，则系统的哈密顿量可以写为：

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{BH}} = & - \sum_{j,j'} \sum_{l,l'=1}^m \left[t_{j(l),j'(l')} \hat{a}_{j(l)}^\dagger \hat{a}_{j'(l')} + \text{h.c.} \right] \\ & + \sum_j \sum_{l=1}^m \left[\frac{U_{(l)}}{2} \hat{n}_{j(l)} (\hat{n}_{j(l)} - 1) - \sum_l \sum_{l=1}^m \mu_{(l)} \hat{n}_{j(l)} \right] \end{aligned} \quad (2-66)$$

在上式中， $\hat{a}_{j(l)}$ 表示在第 j 个晶胞中的第 l 个格点上的湮灭算符， $t_{j(l),j'(l')}$ 表明可以在任何晶胞的任何格点之间发生跃迁， $U_{(l)}$ 表明我们只考虑同一晶胞和格点上粒子之间的相互作用， $\mu_{(l)}$ 说明不同晶胞中等价的格点具有相同的化学势。为了能描述系统的对称性破缺，引入流矢量 $\vec{J} = (J_1, \dots, J_m)^\text{T}$ ， $\vec{J}^\dagger = (J_1^*, \dots, J_m^*)$ ，这样可以得到含流的表达式：

$$\hat{H}_{\text{BH}}(\vec{J}, \vec{J}^\dagger) = \hat{H}_{\text{BH}} + \sum_j \sum_{l=1}^m (J_l \hat{a}_{j(l)}^\dagger + J_l^* \hat{a}_{j(l)}) \quad (2-67)$$

为了从单参数的情况推广到多参数的情况，我们将系统的自由能对流 \vec{J}, \vec{J}^\dagger 以及 $t_{j(l),j'(l')}$ 进行泰勒展开。本质上来说，跃迁项应该是一个矩阵，但是为了简便起见，只考虑系统的某一个 t 起主导作用（比如相邻格点之间的跃迁），而忽略其他的跃迁项。这样系统的自由能可以展开为

$$F(\vec{J}, \vec{J}^\dagger, t) = N_s \left[F_0(t) + \vec{J}^\dagger C_2(t) \vec{J} + \dots \right] \quad (2-68)$$

式中矩阵 $C_2(t)$ 的每一个元素 $c_{2ll'}(t)$ 都可以对跃迁项进行展开

$$c_{2ll'}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-t)^n \alpha_{2ll'}^{(n)} \quad (2-69)$$

系统中所有的不同晶胞内的等价的格点构成了一个子系统。对每一个子系统而言，它的序参量都可能不同，因此系统的序参量也是矢量 $\vec{\Psi} = (\psi_1, \dots, \psi_m)^\text{T}$ ， $\vec{\Psi}^\dagger = (\psi_1^*, \dots, \psi_m^*)$ ，它们可以表示为：

$$\begin{aligned} \vec{\Psi} &= (\langle \hat{a}_1 \rangle, \dots, \langle \hat{a}_m \rangle)^\text{T} \\ \vec{\Psi}^\dagger &= (\langle \hat{a}_1^\dagger \rangle, \dots, \langle \hat{a}_m^\dagger \rangle) \end{aligned} \quad (2-70)$$

这样可以得到

$$\psi_i = \frac{1}{N_s} \frac{\partial F}{\partial J_i^*} \quad \psi_i^* = \frac{1}{N_s} \frac{\partial F}{\partial J_i} \quad (2-71)$$

同样可以做勒让德变换得到系统的推广的有效势，它和广义的序参量 $\vec{\Psi}, \vec{\Psi}^\dagger$ 相关：

$$\Gamma(\vec{\Psi}, \vec{\Psi}^\dagger, t) = F/N_s - \vec{J}^\dagger \vec{\Psi} - \vec{\Psi}^\dagger \vec{J} \quad (2-72)$$

和单参数的情况相同，外源项可以通过对有效势求导得到

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial \psi_i} = -J_i^* \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial \psi_i^*} = -J_i \quad (2-73)$$

因为当外源项为零时，含流的哈密顿量回归到原哈密顿量，所以序参量可以通过找有效势的最小值来确定。

由式(2-68), (2-71), 和(2-72)可知广义的有效势可以写为:

$$\Gamma(\vec{\Psi}, \vec{\Psi}^\dagger, t) = F_0(t) + \vec{\Psi}^\dagger A_2(t) \vec{\Psi} + \dots \quad (2-74)$$

将式(2-74)代入到式(2-73)中得到

$$A_{2,ij} = \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \psi_i^* \partial \psi_j} = -\frac{\partial J_i}{\partial \psi_j} \quad (2-75)$$

由上式和式(2-68)、(2-71)，可得:

$$-\delta_{ij} = A_{2,ik} \frac{\partial \psi_k}{\partial J_j} = \frac{1}{N_s} A_{2,ik} \frac{\partial^2 F}{\partial J_k^* \partial J_j} = (A_2 C_2)_{ij} \quad (2-76)$$

所以，矩阵 A_2 和矩阵 C_2 互为逆矩阵。由于 C_2 的每一个元素都可以通过对跃迁项 t 进行展开得到，这样，相应的 A_2 矩阵的每一个元素也可以得到。矩阵形式上， A_2 对 t 展开的前几项可以写为:

$$C_2^{-1} = (\alpha_2^{(0)})^{-1} \left\{ 1 + \alpha_2^{(1)} (\alpha_2^{(0)})^{-1} t + \left[\alpha_2^{(1)} (\alpha_2^{(0)})^{-1} \alpha_2^{(1)} (\alpha_2^{(0)})^{-1} + \alpha_2^{(2)} (\alpha_2^{(0)})^{-1} \right] t^2 + \dots \right\} \quad (2-77)$$

该式在单参量的情况下回归到式(2-65)。对于相边界，还是通过有效势对应的极小值的序参量从零到非零来确定，在所有的序参量都同时不为零的情况下，相边界条件为

$$\text{Det } A_2 = 0 \quad (2-78)$$

但是也有可能系统的某些子系统的序参量先变为非零，此时对应的是 A_2 的某个顺序主子式的秩为零。原则上来说，需要列出所有的方程，然后找出其中最小的那个正实数解，就是真实的相边界。但是一般可以通过对系统的物理分析来进行简化。而且，系统的相边界条件也告诉了人们系统内部变成超流态的具体形式：是所有的子系统一起超流，还是只有部分子系统进入了超流态。

2.5 正方和立方超光晶格的相图的计算

在这里我们运用前面介绍过的方法来计算四方晶格和立方超光晶格系统的相图。跟之前介绍的一样，首先要引入流 $\vec{J} = (J_A, J_B)^T$ ，这样可以得到:

$$\hat{H}_{\text{SL}}(\vec{J}, \vec{J}^\dagger) = \hat{H}_{\text{SL}} + \sum_{j \in A} (J_A \hat{a}_j^\dagger + J_A^* \hat{a}_j) + \sum_{j \in B} (J_B \hat{a}_j^\dagger + J_B^* \hat{a}_j) \quad (2-79)$$

系统的自由能可以写成式(2-68)的形式，这中间的 $C_2(t)$ 可以写成

$$\begin{pmatrix} c_{2AA} & c_{2AB} \\ c_{2BA} & c_{2BB} \end{pmatrix} = \sum_{n=0}^{\infty} (-t)^n \begin{pmatrix} \alpha_{2AA}^{(n)} & \alpha_{2AB}^{(n)} \\ \alpha_{2BA}^{(n)} & \alpha_{2BB}^{(n)} \end{pmatrix} \quad (2-80)$$

然后对自由能做勒让德变换(2-72)得到系统的有效势(2-74)。由前面的章节的介绍可知系统的序参量为 $\vec{\Psi} = (\langle \hat{a}_A \rangle, \langle \hat{a}_B \rangle)^T$ ，并且矩阵 A_2 和 C_2 互为逆矩阵。当系统发生相变时，序参量 $\vec{\Psi} = (0, 0)^T$ 变得不再稳定，对应着系统的有效势的二阶系数 A_2 的秩为零。综合以上信息，可以得到系统的边界条件方程为

$$(\beta^{(0)})^2 - \beta^{(0)}\beta^{(1)}t - \frac{\beta^{(2)}t^2}{2} = 0 \quad (2-81)$$

式中的简写 $\beta^{(0)} = \sqrt{\alpha_{2AA}^{(0)}\alpha_{2BB}^{(0)}}$ ， $\beta^{(1)} = \alpha_{2AB}^{(1)}$ ， $\beta^{(2)} = \alpha_{2AA}^{(2)}\alpha_{2BB}^{(0)} + \alpha_{2AA}^{(0)}\alpha_{2BB}^{(2)} - 2(\alpha_{2AB}^{(1)})^2$ 。由于最小的正实根才是真实的相边界，我们可以得到临界的 t_c 为

$$t_c = \frac{\beta^{(0)} \left[-\beta^{(1)} + \sqrt{(\beta^{(1)})^2 + 2\beta^{(2)}} \right]}{\beta^{(2)}} \quad (2-82)$$

这样的话，计算相边界条件的问题就被简化到对微扰系数 $\alpha_{2ll'}^{(n)}$ 的计算。这种微扰计算可以通过一种系统的图形法^[66]来执行。系统的基态能量为：

$$E^{(0)}(n_A, n_B) = \frac{U}{2}n_A(n_A - 1) + \frac{U}{2}n_B(n_B - 1) - (\mu + \Delta\mu)n_A - \mu n_B \quad (2-83)$$

这样的话对于不同的子系统粒子数我们可以定义

$$\begin{aligned} \lambda_A^{\pm(p)} &= \left[E^{(0)}(n_A, n_B) - E^{(0)}(n_A \pm p, n_B) \right] / N_s \\ \lambda_B^{\pm(p)} &= \left[E^{(0)}(n_A, n_B) - E^{(0)}(n_A, n_B \pm p) \right] / N_s \end{aligned} \quad (2-84)$$

对于 $p = \pm 1$ 来说，可以把它简记为 $\lambda_A^\pm = \lambda_A^{\pm(1)}$ ， $\lambda_B^\pm = \lambda_B^{\pm(1)}$ 。这样得到 $\alpha_{2ll'}^{(n)}$ 的零阶和一阶系数为：

$$\alpha_{2AA(BB)}^{(0)} = \frac{n_{A(B)} + 1}{\lambda_{A(B)}^+} + \frac{n_{A(B)}}{\lambda_{A(B)}^-} \quad (2-85)$$

$$\alpha_{2AB}^{(1)} = \alpha_{2BA}^{(1)} = z\alpha_{2AA}^{(0)}\alpha_{2BB}^{(0)} \quad (2-86)$$

而二阶系数为：

$$\begin{aligned} \alpha_{2AA}^{(2)} &= z(z-1)(\alpha_{2AA}^{(0)})^2\alpha_{2BB}^{(0)} + z \left[\frac{n_A^2 n_B}{(\lambda_A^-)^2 \lambda_B^-} + \frac{n_A n_B (1+n_A)}{\lambda_A^- (\lambda_A^+ + \lambda_B^-)} \left(\frac{2}{\lambda_B^-} - \frac{1}{\lambda_A^+ + \lambda_B^-} - \frac{1}{\lambda_A^-} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{n_A (1+n_A) (1+n_B)}{\lambda_A^+ (\lambda_A^- + \lambda_B^+)} \left(\frac{2}{\lambda_B^+} - \frac{1}{\lambda_A^- + \lambda_B^+} - \frac{1}{\lambda_A^+} \right) + \frac{n_B (n_A + 1)^2}{\lambda_A^+ + \lambda_B^-} \left(\frac{\lambda_A^+ - \lambda_B^-}{\lambda_A^+ \lambda_B^- (\lambda_A^+ + \lambda_B^-)} - \frac{1}{(\lambda_A^+)^2} \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{n_A^2 (1 + n_B)}{\lambda_A^- + \lambda_B^+} \left(\frac{\lambda_A^- - \lambda_B^+}{\lambda_A^- \lambda_B^+ (\lambda_A^- + \lambda_B^+)} - \frac{1}{(\lambda_A^-)^2} \right) + \frac{(1 + n_A)(2 + n_A)n_B}{\lambda_A^{+(2)} + \lambda_B^-} \left(\frac{1}{\lambda_A^+} + \frac{1}{\lambda_A^+ + \lambda_B^-} \right)^2 \\
 & + \frac{(n_A - 1)(1 + n_B)n_A}{\lambda_A^{-(2)} + \lambda_B^+} \left(\frac{1}{\lambda_A^-} + \frac{1}{\lambda_A^- + \lambda_B^+} \right)^2 + \frac{(1 + n_A)^2 (1 + n_B)}{(\lambda_A^+)^2 \lambda_B^+} \Big] \quad (2-87)
 \end{aligned}$$

而对于 $\alpha_{2BB}^{(2)}$ 来说只要把上式中的角标A和B颠倒就行。为了得到整个的相图，还需要分析在 $t = 0$ 的时候的情况，这时由式(2-83)可得 $F_0(t = 0) = N_s E^{(0)}(n_A, n_B)$ 。假设 $\Delta\mu$ 处在 $[0, U)$ 的区间。与普通的玻色-哈伯德模型相同的是，系统也存在着莫特绝缘态，此时 $n_A = n_B = n$ 。由于存在 $\Delta\mu$ 破坏了系统的平移对称性，莫特绝缘态只出现在以下区间：

$$\text{Mott-}n: \quad U(n - 1) < \mu < Un - \Delta\mu \quad (2-88)$$

另一方面，系统也存在密度波相，这时 $n_B = n_A - 1, n_A = n$ ，系统的总填充数为 $n + 1/2$ 。它存在于以下区间：

$$\text{DW-}n: \quad (n - 1)U - \Delta\mu < \mu < (n - 1)U \quad (2-89)$$

因此，以上的两个态之间的竞争取决于 $\Delta\mu$ 。当逐渐从零增大系统的跃迁项之后，系统的绝缘态就会逐渐的被融化掉，从式(2-85)–(2-87)就可以得到系统的相图。如图2-10和2-11所示，二阶近似结果和QMC的结果很接近，误差在百分

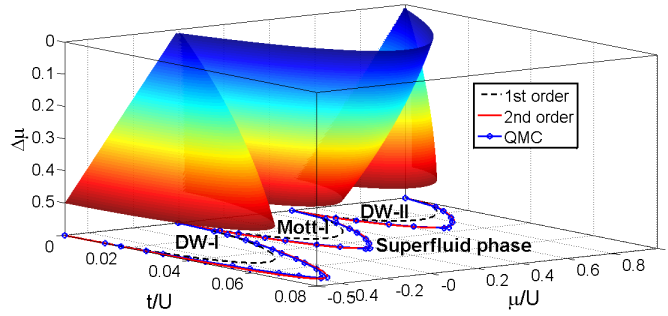


图 2-10 正方超光晶格中玻色子系统的量子相图

Fig. 2-10 Quantum phase diagram of Bosons on square superlattice

之三之内，证明了该方法的有效性。上海大学的姜颖教授的小组也正在试图将该方法推广到高阶^[90]。图2-10也表示随着 $\Delta\mu$ 的增大，莫特态的区域在逐渐减小，而密度波态的区域在逐渐变大。从图2-12可以更清楚的看出，系统在三维的时候也遵循同一规律。

对比不同的维度的相图，我们发现无论是莫特绝缘态，还是密度波态，都是在三维的时候的比在二维的时候要小，这表明维度的效应在两种不可压缩态中所起到的作用是相同的。

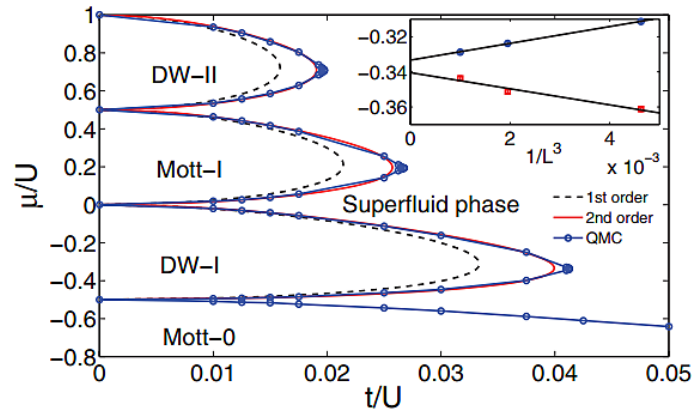


图 2-11 立方超光晶格中玻色子系统的量子相图

Fig.2-11 Quantum phase diagram of Bosons on cubic superlattice

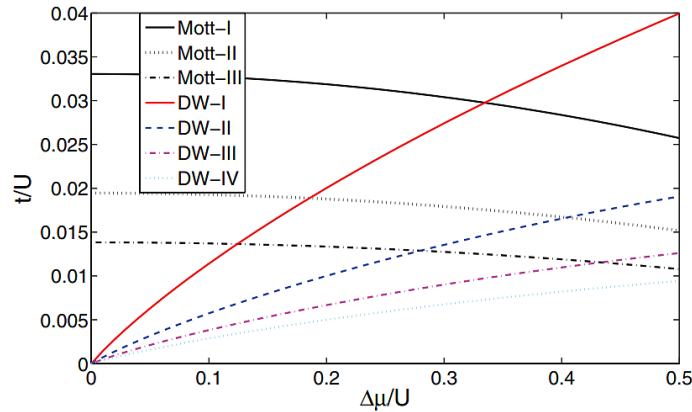


图 2-12 立方超光晶格中玻色子系统的临界跃迁值

Fig.2-12 Critical hopping t_c of Bosons on cubic superlattice system

2.6 微扰论的图形表示方法

在计算各种超光晶格的相图时，微扰系数可以通过适当的图形表示方法，并运用瑞利-薛定谔公式进行计算^[74]。我们在这里以最简单的立方（正方）晶格中的各阶微扰系数 $\alpha_{2ll}^{(n)}$ 为例来说明，三角晶格和笼壁晶格中的系数可以通过这里介绍的方法很容易的得到。如果将产生（湮灭）算符用一个带箭头的直线指向（背向）该点来表示，那么每一个 $\alpha_{2ll}^{(n)}$ 的项都可以表示成一个箭头图，该图由 n 条内线和两条外线组成。内线表示粒子在相邻格点之间的跃迁，而外线表示额外的产生和湮灭算符。表 2-1表示了到二阶截断的 $\alpha_{2ll}^{(n)}$ 的所有的图形表示。

为了计算系数 $\alpha_{2ll}^{(n)}$ ，还需要引进点线图，这个方法也已经在文献[74]中有详细的解释。为了清楚起见我们引入一个哈密顿量，它可以分为微扰的部分 \hat{W} 和

非微扰的部分 \hat{H}_0

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} + \delta\hat{W} \quad (2-90)$$

这里参数 λ 和 δ 都是小量，系统的每一个微扰项都可以在一下规则下用点线图来表示：

- 点1和2 分别表示微扰项 \hat{V} 和 \hat{W} 。
- 内线表示两个点通过以下因子联系在一起

$$\sum_{m \neq n} \frac{1}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^p} |\Psi_m^{(0)}\rangle \langle \Psi_m^{(0)}|$$

其中 \hat{H}_0 的基态是 $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ ，基态能量是 $E_n^{(0)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}_0 | \Psi_n^{(0)} \rangle$ ， $|\Psi_m^{(0)}\rangle$ 表示的是一个能量为 $E_m^{(0)}$ 的激发态，而 p 表示的是两个点之间连线的个数。

- $\langle \Psi_n^{(0)} |$ 和 $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ 分别表示的是向左和向右的外线，所以在图形表示能量 $E_n^{(i)}$ ，有可能会出出现 s 个不相连的部分。这时这些图的权重必须乘以因子 $(-1)^{s-1}$ 。

根据这些规则可以得到微扰论的点线图表示。

$$\begin{aligned} E_n = E_n^{(0)} &+ \lambda \text{---}\overset{1}{\bullet}\text{---} + \delta \text{---}\overset{2}{\bullet}\text{---} + \lambda\delta \left(\text{---}\overset{1}{\bullet}\overset{2}{\bullet}\text{---} \right. \\ &+ \left. \text{---}\overset{2}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\text{---} \right) + \lambda^2 \text{---}\overset{1}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\text{---} + \delta^2 \text{---}\overset{2}{\bullet}\overset{2}{\bullet}\text{---} \\ &+ \lambda^2\delta \left(\text{---}\overset{1}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\overset{2}{\bullet}\text{---} + \text{---}\overset{1}{\bullet}\overset{2}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\text{---} + \text{---}\overset{2}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\text{---} \right. \\ &+ \left. \text{---}\overset{1}{\bullet}\overset{2}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\text{---} + \text{---}\overset{2}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\overset{2}{\bullet}\text{---} + \text{---}\overset{2}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\text{---} \right) + \dots \end{aligned} \quad (2-91)$$

具体到正方和立方的晶格，非微扰的哈密顿量为：

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \frac{U}{2} \hat{n}_A (\hat{n}_A - 1) + \frac{U}{2} \hat{n}_B (\hat{n}_B - 1) \\ - (\mu + \Delta\mu) \hat{n}_A - \mu \hat{n}_B \end{aligned} \quad (2-92)$$

它的本征能量为非微扰的能量。而跃迁项和外源项都被当做是微扰项。这样根据上面的规则，就可以把每一个箭头图写成点线图，对每一个箭头图我们将其中的所有的内线和外线都标号，而每一个箭头图对应着所有的排序可能的点线图，然后把他们的结果相加。比如

$$\text{---}\overset{1}{\bullet}\overset{2}{\bullet}\text{---} = - \text{---}\overset{1}{\bullet}\overset{2}{\bullet}\text{---} + - \text{---}\overset{2}{\bullet}\overset{1}{\bullet}\text{---} \quad (2-93)$$

这其中 i 表示某个特定的光晶格的子系统。

表 2-1 $\alpha_{2ll}^{(n)}$ 的非零的各阶元素的点线图表示

 Table 2-1 agrammatic arrow line expressions of the non-vanishing elements $\alpha_{2ll}^{(n)}$

各阶微扰系数	图形表示
$\alpha_{2AA}^{(0)}$	
$\alpha_{2BB}^{(0)}$	
$\alpha_{2AB}^{(1)}$	
$\alpha_{2BA}^{(1)}$	
$\alpha_{2AA}^{(2)}$	
$\alpha_{2BB}^{(2)}$	

2.7 广义朗道有效势理论和解耦合平均场理论的对比

本章最后比较一下推广的朗道有效势理论和处理超光晶格系统时最常用的解耦合平均场理论的优劣。在这里，首先回顾一下解耦合平均场方法。首先，算符 $\hat{a}_i^\dagger(\hat{a}_i)$ 被分解成两部分，一部分是平均场下的量 $\psi_i^*(\psi_i)$ ，也就是序参量，另一部分是 $\delta\hat{a}_i^\dagger(\delta\hat{a}_i)$ ，它表示平均场附近的量子扰动。如果我们忽略量子扰动的二阶小量，并且认为由于子系统的一致性的各个格点的一致性，序参量也应该是一样的，那么平均场下系统的哈密顿量(2-53)可以表示为

$$\hat{H}_{MF} = \hat{H}_0 + tz(\psi_A^*\psi_B + \psi_B^*\psi_A - \hat{a}_A^\dagger\psi_B - \hat{a}_B^\dagger\psi_A - \hat{a}_A\psi_B^* - \hat{a}_B\psi_A^*) \quad (2-94)$$

而这其中， \hat{H}_0 的表达式为

$$\hat{H}_0 = \frac{U}{2}\hat{n}_A(\hat{n}_A - 1) + \frac{U}{2}\hat{n}_B(\hat{n}_B - 1) - (\mu + \Delta\mu)\hat{n}_A - \mu\hat{n}_B \quad (2-95)$$

因为系统的序参量在二次相变的相边界附近是一个小量，因此可以将系统的能量对于序参量进行展开，

$$F_{MF} = f_0 + f_{2A}|\psi_A|^2 + f_{2B}|\psi_B|^2 + f_{2AB}\psi_A\psi_B^* + f_{2BA}\psi_B\psi_A^* + \dots \quad (2-96)$$

在这其中， f_0 和前面对广义的朗道有效势理论分析时一样，是跃迁振幅 t 为零的时候的系统的能量的表达式，因此它的表达式为 $F_0(t=0) = N_s E^{(0)}(n_A, n_B)$ 。我们据此同样可以分析出来，系统中存在莫特绝缘态和密度波态。如果我们只考虑零温时的情况，那么系统的基态能量和系统的自由能是相等的，因此我们只需在不同的填充数的基础上做微扰的计算来得到二阶的系数。这样可以得到系统

的二阶系数为

$$f_{2A} = t^2 z^2 \left[\frac{n_B}{U(n_B - 1) - \mu} + \frac{n_B + 1}{\mu - Un_B} \right] \quad (2-97)$$

$$f_{2B} = t^2 z^2 \left[\frac{n_A}{U(n_A - 1) - \mu - \Delta\mu} + \frac{n_A + 1}{\mu + \Delta\mu - Un_A} \right]$$

上式和式(2-88)和式(2-89)放在一起, 我们发现对于二阶导数来说

$$\left. \frac{\partial^2 F_{MF}}{\partial \psi_A \partial \psi_A^*} \right|_{\psi_A, \psi_B=0} = f_{2A} < 0$$

$$\left. \frac{\partial^2 F_{MF}}{\partial \psi_B \partial \psi_B^*} \right|_{\psi_A, \psi_B=0} = f_{2B} < 0 \quad (2-98)$$

这表明, 系统的自由能在 $\psi_A = \psi_B = 0$ 的时候是处在一个极大值的状态, 而不是一个最小值的状态, 这与已知的物理学的知识是相矛盾的。我们觉得这是解耦合平均场方法的一个主要矛盾, 与系统无关, 因为在三角超晶格和笼壁超晶格中也看到了类似的情况, 而在普通的平均场中, 这种矛盾是不存在的。

下面证明广义的朗道有效势理论方法不存在这种问题。首先可以根据二阶的系数之间的关系得到

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} a_{2AA} & a_{2AB} \\ a_{2BA} & a_{2BB} \end{vmatrix} &= \frac{1}{\begin{vmatrix} -c_{2AA} & -c_{2AB} \\ -c_{2BA} & -c_{2BB} \end{vmatrix}} \\ &= \frac{1}{(\sqrt{c_{2AA}c_{2BB}} + c_{2AB})(\sqrt{c_{2AA}c_{2BB}} - c_{2AB})} \end{aligned} \quad (2-99)$$

以二阶系数的一阶微扰论结果来说明这个问题。因为 $c_{2AB}^{(1)} = -tz\alpha_{2AA}^{(0)}\alpha_{2BB}^{(0)} < 0$, $c_{2AA}^{(0)} = \alpha_{2AA}^{(0)} < 0$, $c_{2BB}^{(0)} = \alpha_{2BB}^{(0)} < 0$, 所以 $\sqrt{c_{2AA}c_{2BB}} - c_{2AB} > 0$ 。考虑到系统的相边界条件为 $\sqrt{c_{2AA}c_{2BB}} + c_{2AB} = 0$, 并且 t 在从超流态到莫特绝缘态的时候是逐渐减小的, 因此

$$\begin{vmatrix} a_{2AA} & a_{2AB} \\ a_{2BA} & a_{2BB} \end{vmatrix} > 0 \quad (2-100)$$

并且

$$a_{2AA} = \frac{-c_{2BB}}{\begin{vmatrix} -c_{2AA} & -c_{2AB} \\ -c_{2BA} & -c_{2BB} \end{vmatrix}} > 0 \quad (2-101)$$

同理也可以推导出 a_{2BB} 也是大于零的。所以, 广义个有效势理论方法在理论上是自洽的, 这一点是它相对于解耦合平均场来说最大的优势。

另一个优势是在精度上。推广的有效势朗道理论在计算到二阶的时候在三

维的时候误差小于3%，在已知的解析方法中具有最高的精度；而在对于正方晶格的时候也是小于6%。并且它可以通过计算机等工具计算到更高阶^[4]。而解耦合平均场方法的结果与真实的相边界的误差是30%左右。

但是，广义的朗道有效势理论也是有缺点的。对于正方晶格来说，它在有些参数的情况下不能得到系统的密度波态的完整的相图。比如在 $\Delta\mu < 0.35U$ 的时候，式(2-82)中的相边界中的平方根下为负，因此得不到完整的相图，但是我们觉得这个问题在考虑更为高阶的结果的时候可以得到解决。

2.8 本章小结

在本章中，我们将朗道-金兹堡有效势理论（EPLT）从单参数的情况发展到多参数的情况，并且将它运用到了各种不同几何结构的超光晶格上，得到了它们在零温下的相图。这些相图和QMC数值模拟结果的对比证明了该方法的有效性。本章最后比较了这种推广的有效势理论的方法和解耦合平均场方法优劣。当然，本章的结果仅仅限于零温情况，要得到非零温情况下的相图以及计算系统的动态问题需要引入傅里叶变换，这将是后续的研究工作。

第3章 阻错超光晶格中玻色子系统的相图以及临界性质的研究

3.1 引言

除了作为一个量子模拟器，光晶格中的玻色子系统也可以作为一个研究多体系统的量子相变的理想平台，因为它的各个参数可以在很大的范围内进行调节。而在阻错晶格中，比如三角晶格和笼壁晶格中，系统展现出了比在正方晶格和立方晶格中更为丰富的量子性质。但是，对于阻错晶格和超晶格组合起来的系统，现在还未得到充分的研究。而G. E. Akpojotor在2012年的一篇文章中指出，阻错超光晶格中的费米子系统可以用来模拟自旋序的模型，这对于人们理解超流的性质至关重要^[83]。而对于阻错超光晶格中玻色子的系统的研究是将来对费米子系统研究的铺垫和基础，因为硬核玻色子可以映射到自旋为1/2的费米子系统。因此，对阻错超光晶格中玻色子系统的理论研究可以为后续的理论研究和实验研究提供必要的理论支持和参考数据，是一件很有意义的事情。另外，直到最近，人们才开始对超流的张量性质感兴趣，各向异性的超流被看做是理解超固体性质的一个桥梁。从2011年起，人们陆续发现在光势阱中的弱长程相互作用会使玻色子系统出现各向异性的超流^[84, 85, 87]，并分析了温度对这种各向异性的超流性质的影响。2014年，人们又在自旋轨道耦合的费米系统中发现了各向异性的超流性质^[86]。在本章，我们设计出一种光晶格中强耦合作用的玻色子系统来展示超流的这种张量性质，这种系统就是笼壁超光晶格系统。

本章研究在三角超光晶格和笼壁超光晶格中的玻色子系统的相图和临界物理性质。我们首先给出在实验上实现这些超光晶格的建议，然后用广义的朗道有效势理论得到了系统的相图，最后重点讨论了笼壁超光晶格的各向异性的超流性质并对其在实验上的观测图像的进行了数值模拟。

3.2 关于实验上实现阻错超光晶格系统的建议

相比正方或立方超光晶格，超三角晶格的形成就要复杂一些。我们也提出了一个在实验上比较容易实现的方案。汉堡的实验小组让同一平面上的互成 120° 的交角的三束激光相干就形成了三角晶格^[88]。要实现三角的超光

晶格，我们还需要另外三束光，这三束光的波长是原光的 $\sqrt{3}$ 倍，比如，在实验上，可以用 543nm 和 940nm 的激光来实现。所有的六束光都必须在 $x-y$ 平面内传播，并且他们的偏振方向都是垂直于 $x-y$ 平面的。前三束光的波矢分别为 $\vec{k}_1 = \frac{2\pi}{a}(0, 1)$ ， $\vec{k}_2 = \frac{2\pi}{a}(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})$ 和 $\vec{k}_3 = \frac{2\pi}{a}(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})$ ，后三束光的波矢分别为 $\vec{k}_4 = \frac{2\pi}{a}\frac{\sqrt{3}}{3}(1, 0)$ ， $\vec{k}_5 = \frac{2\pi}{a}\frac{\sqrt{3}}{3}(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$ 和 $\vec{k}_6 = \frac{2\pi}{a}\frac{\sqrt{3}}{3}(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ 。前三束光的振幅为 E_0 ，而后三束光的振幅为 δE_0 ， δ 为一个小量。从本质上来说，它也是两套光晶格的叠加。这样可以得到光晶格的势能为

$$V = V_0 \left[\delta^2 \left(\cos\left(\frac{x}{\sqrt{3}}\right) + 2 \cos\left(\frac{x}{2\sqrt{3}}\right) \cos\left(\frac{y}{2}\right) \right)^2 + \left(2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}x}{2}\right) \cos\left(\frac{y}{2}\right) + \cos(y) \right)^2 \right] \quad (3-1)$$

在上式中 $V_0 = E_0^2$ 。如图 3-1 所示，系统既有三角的对称性，且又具有超晶格的特性（图中颜色更深的格点表示格点的深度越深）。

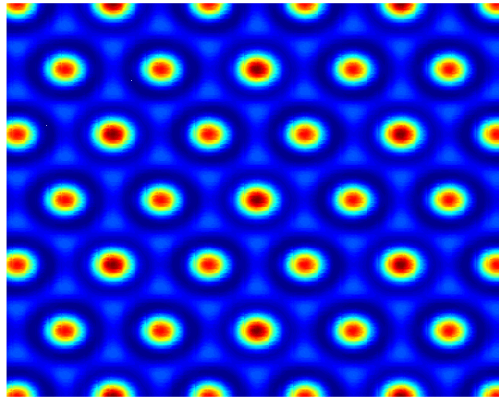


图 3-1 三角超光晶格系统

Fig.3-1 Triangular superlattice System

笼壁（Kagome）超光晶格的实现也比较简单，只需要在伯克利的实验小组实现笼壁晶格的基础上^[89]做一个小小的改动就行。伯克利的实验小组是这样实现笼壁晶格的：他们首先用三束光进行蓝移调制，来实现三角晶格，然后用三束强度相同的两倍波长的光进行红移调制，由前面简介里面我们对红移和蓝移调制的说明可知，它们形成的光晶格的势阱的极小值处与光强的关系正好相反，这样红移光形成的周期性的势阱会抵消掉前面的三角晶格的某些极小值，于是就形成了笼壁晶格。而形成笼壁超晶格只需要对红移调制光的某一束光的强度略微增强就行，如图 3-2 所示，我们增强了沿 y 方向传播的光，使得 $\gamma = V_E/V_0$ ，则可以得到系统的势场为：

$$V_c/V_0 = \gamma^2 + 4\gamma \cos(k_x x') \cos(k_y y') + 2 \cos(2k_y y') - 2 \cos(4k_y y') - 4 \cos(2k_x x') \cos(2k_y y') - 1 \quad (3-2)$$

在上式中, $k_x = 3k/4$, $k_y = \sqrt{3}k/4$, k 是长波长激光的波矢。笼壁超光晶格中存在各向异性的超流, 这对于理解超流的矢量性质有很大的帮助。对此我们会在本书的后面来说明。

3.3 阻错超光晶格中玻色子系统的量子相图

在计算阻错超光晶格中玻色子系统的相图之前, 让我们首先来探讨描述这种阻错超光晶格中玻色子系统的哈密顿量。上一章中介绍过, 在紧束缚近似下, 对于不同深度的格点而言, 可以忽略它们之间的格点上原子的相互作用大小差异, 而仅仅保留化学势的差异。但是在阻错超光晶格中, 不同的子系统的格点之间的跃迁振幅的大小也是不一样的, 比如在笼壁超光晶格中, 如图3.3中, 子系统A中的格点到子系统B或C的格点之间的跃迁振幅和B到C的格点之间的跃迁振幅是明显不同的。但是为了简便起见, 我们认为子系统A中的格点深度和子系统B和C之间的格点深度之差是非常小的, 因此可以近似的用下面的哈密顿量来描述

$$\hat{H}_{SL} = -t \sum_{\langle j, j' \rangle} (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} + \hat{a}_j \hat{a}_{j'}^\dagger) + \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) - (\Delta\mu) \sum_{j \in A} \hat{n}_j - \mu \sum_j \hat{n}_j \quad (3-3)$$

式中 $\Delta\mu$ 表示子系统A中的格点相对于系统的其它部分来说增加了一个小的化学势。这个哈密顿量既适用于三角超光晶格, 也适用于笼壁超光晶格, 这两者不同的只是他们的晶格结构。

下面来计算超三角晶格, 与前面的立方晶格不同的是, 在计算超三角晶格时, 需要将系统考虑成三个子系统, 虽然在这三个子系统中, B和C是完全等价的, 但是将系统分成三个子系统后不需要考虑子系统内部格点之间的耦合, 而只需要考虑不同系统之间的耦合, 因此会大大的简化计算。根据前面对广义的朗道有效势理论方法的介绍我们知道, 要得到相边界, 需要计算自由能展开的二阶矩阵C, 在这里和前面计算立方晶格的情况相同。

$$C_2 = \alpha_0 t^0 + \alpha_1 t^1 + \alpha_2 t^2 \quad (3-4)$$

由于子系统B和C等价, 所以这两个子系统的矩阵元应该是相同的, 因此 α_0 , α_1 和 α_2 可以如下表示为

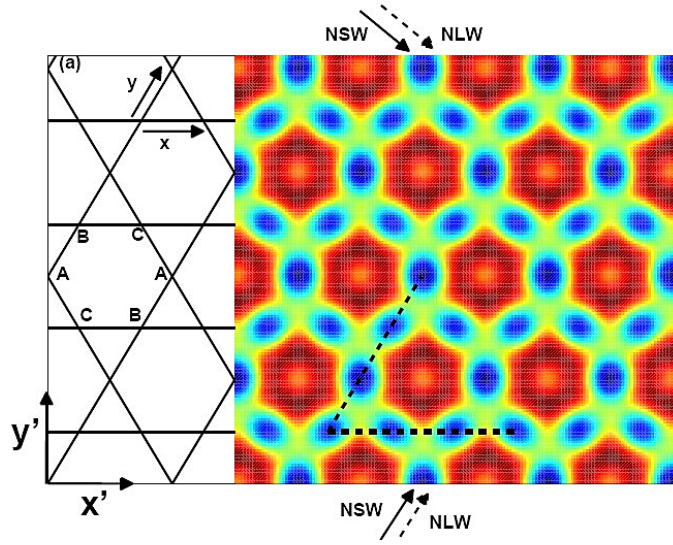


图 3-2 笼壁超光晶格系统

Fig.3-2 Kagome superlattice System

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & a_2 & a_2 \\ a_2 & 0 & a_3 \\ a_2 & a_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (3-5)$$

和

$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} a_4 & a_5 & a_5 \\ a_5 & a_6 & a_7 \\ a_5 & a_7 & a_6 \end{pmatrix} \quad (3-6)$$

而根据上一章对广义的朗道有效势理论的介绍我们知道，矩阵 A_2 是矩阵 C_2 的逆，因此可以得到

$$A_2 = \begin{pmatrix} e_1 & e_3 & e_3 \\ e_3 & e_2 & e_4 \\ e_3 & e_4 & e_2 \end{pmatrix} \quad (3-7)$$

这其中

$$e_1 = \frac{1}{a_0} + \left(\frac{2a_2^2}{a_0^2 a_1} + \frac{a_4}{a_0^2} \right) t^2 \quad (3-8)$$

$$e_2 = \frac{1}{a_1} + \left(\frac{2a_2^2}{a_0 a_1^2} + \frac{a_3^2}{a_1^3} + \frac{a_6}{a_1^2} \right) t^2 \quad (3-9)$$

$$e_3 = \frac{a_2}{a_0 a_1} * t + \left(\frac{a_2 a_3}{a_0 a_1^2} + \frac{a_5}{a_0 a_1} \right) t^2 \quad (3-10)$$

$$e_4 = \frac{a_3}{a_1^2} * t + \left(\frac{a_2^2}{a_0 a_1^2} + \frac{a_7}{a_1^2} \right) t^2 \quad (3-11)$$

如果把上面的式子带入到相边界条件，可以得到：

$$e_2^2 + e_2 e_4 - 2e_3^2 = 0 \quad (3-12)$$

上式的最小的正实根就是相边界条件。由于它是一个关于跃迁 t 的四次方程，因此需要用数值的方法去求解。

到上式为止，我们把对相边界的求解再次的简化到对系统的微扰系数 $a_{(n)}$ 的求解，这些系数的求解仍然可以和在立方晶格中的一样，可以用图形表示法求解，如果用非微扰能量

$$E^{(0)}(n_A, n_B) = \frac{U}{2} n_A (n_A - 1) + \frac{U}{2} n_B (n_B - 1) - (\mu + \Delta\mu) n_A - \mu n_B \quad (3-13)$$

来定义和在立方晶格中相同的能量差 λ ，则可以计算得到各阶的系数。零阶和一阶的系数为：

$$a_0 = \frac{n_A + 1}{\lambda_A^+} + \frac{n_A}{\lambda_A^-} \quad (3-14)$$

$$a_1 = \frac{n_B + 1}{\lambda_B^+} + \frac{n_B}{\lambda_B^-} \quad (3-15)$$

$$a_2 = 3a_0 a_1 \quad (3-16)$$

$$a_3 = 3a_1^2 \quad (3-17)$$

而二阶的系数为

$$a_4 = 12a_0^2 a_1 + 6 \left[\frac{n_A^2 n_B}{(\lambda_A^-)^2 \lambda_B^-} + \frac{n_A n_B (1 + n_A)}{\lambda_A^- (\lambda_A^+ + \lambda_B^-)} \left(\frac{2}{\lambda_B^-} - \frac{1}{\lambda_A^+ + \lambda_B^-} - \frac{1}{\lambda_A^-} \right) + \frac{n_A (1 + n_A) (1 + n_B)}{\lambda_A^+ (\lambda_A^- + \lambda_B^+)} \left(\frac{2}{\lambda_B^+} - \frac{1}{\lambda_A^- + \lambda_B^+} - \frac{1}{\lambda_A^+} \right) + \frac{n_B (n_A + 1)^2}{\lambda_A^+ \lambda_B^- (\lambda_A^+ + \lambda_B^-)} \left(\frac{\lambda_A^+ - \lambda_B^-}{\lambda_A^+ \lambda_B^- (\lambda_A^+ + \lambda_B^-)} - \frac{1}{(\lambda_A^+)^2} \right) + \frac{n_A^2 (1 + n_B)}{\lambda_A^- + \lambda_B^+} \left(\frac{\lambda_A^- - \lambda_B^+}{\lambda_A^- \lambda_B^+ (\lambda_A^- + \lambda_B^+)} - \frac{1}{(\lambda_A^-)^2} \right) + \frac{(1 + n_A) (2 + n_A) n_B}{\lambda_A^{+(2)} + \lambda_B^-} \left(\frac{1}{\lambda_A^+} + \frac{1}{\lambda_A^+ + \lambda_B^-} \right)^2 + \frac{(n_A - 1) (1 + n_B) n_A}{\lambda_A^{-(2)} + \lambda_B^+} \left(\frac{1}{\lambda_A^-} + \frac{1}{\lambda_A^- + \lambda_B^+} \right)^2 + \frac{(1 + n_A)^2 (1 + n_B)}{(\lambda_A^+)^2 \lambda_B^+} \right] \quad (3-18)$$

$$a_5 = a_7 = 9a_0 a_1^2 \quad (3-19)$$

和

$$\begin{aligned}
 a_6 = & 6a_0a_1^2 + 6a_1^3 + 0.5(a_4 - 12a_0^2a_1) + 3 \left[\frac{n_B^3}{(\lambda_B^-)^3} + \frac{n_B^2(1+n_B)}{\lambda_B^-(\lambda_B^+ + \lambda_B^-)} \left(\frac{1}{\lambda_B^-} - \frac{1}{\lambda_A^+ + \lambda_B^-} \right) \right. \\
 & + \frac{n_B(1+n_A)^2}{\lambda_B^+(\lambda_B^- + \lambda_B^+)} \left(\frac{1}{\lambda_B^+} - \frac{1}{\lambda_B^- + \lambda_B^+} \right) + \frac{n_B(n_B+1)^2}{\lambda_B^+ + \lambda_B^-} \left(\frac{\lambda_B^+ - \lambda_B^-}{\lambda_B^+\lambda_B^-(\lambda_B^+ + \lambda_B^-)} - \frac{1}{(\lambda_B^+)^2} \right) \\
 & + \frac{n_B^2(1+n_B)}{\lambda_B^- + \lambda_B^+} \left(\frac{\lambda_B^- - \lambda_B^+}{\lambda_B^-\lambda_B^+(\lambda_B^- + \lambda_B^+)} - \frac{1}{(\lambda_B^-)^2} \right) + \frac{(1+n_B)(2+n_B)n_B}{\lambda_B^{+(2)} + \lambda_B^-} \left(\frac{1}{\lambda_B^+} + \frac{1}{\lambda_B^+ + \lambda_B^-} \right)^2 \\
 & \left. + \frac{(n_B-1)(1+n_B)n_B}{\lambda_B^{-(2)} + \lambda_B^+} \left(\frac{1}{\lambda_B^-} + \frac{1}{\lambda_B^- + \lambda_B^+} \right)^2 + \frac{(1+n_B)^3}{(\lambda_B^+)^3} \right] \quad (3-20)
 \end{aligned}$$

为了得到整个的相图，还需要分析在 $t=0$ 时的情况，这时由式(3-13)可得 $F_0(t=0) = N_s E^{(0)}(n_A, n_B)$ 。由于 $\Delta\mu$ 是一个小量，我们假设它处在 $[0, U)$ 的区间。与普通的玻色-哈伯德模型相同的是，系统也存在着莫特绝缘态，此时 $n_A = n_B = n$ 。由于存在 $\Delta\mu$ 破坏了系统的平移对称性，莫特绝缘态只出现在以下区间：

$$\text{Mott-}n: \quad U(n-1) < \mu < Un - \Delta\mu \quad (3-21)$$

另一方面，系统也存在密度波相，这时 $n_B = n_C = n_A - 1, n_A = n$ ，系统的总填充数为 $n + 1/3$ 。它存在于以下区间：

$$\text{DW-}n: \quad (n-1)U - \Delta\mu < \mu < (n-1)U \quad (3-22)$$

因此，以上的两个态之间的竞争取决于 $\Delta\mu$ 。当逐渐从零增大系统的跃迁项之后，系统的绝缘态就会逐渐的被融化掉。从式(3-14)–(3-20)就可以得到系统的相图。和预计的一样，由于超光晶格对系统的平移对称性的破坏，因此系统

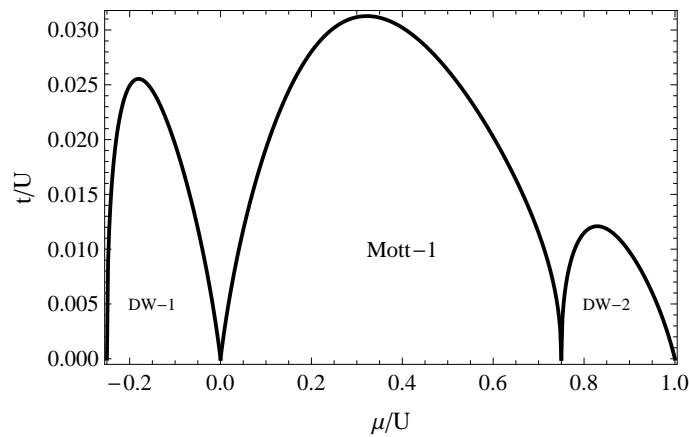


图 3-3 三角超晶格中玻色子系统的量子相图

Fig.3-3 Quantum phase diagram for bosons on triangular superlattice system

中除了出现了莫特绝缘态之外，也有密度波态。而图 3-4 表明，随着系统的 $\Delta\mu$

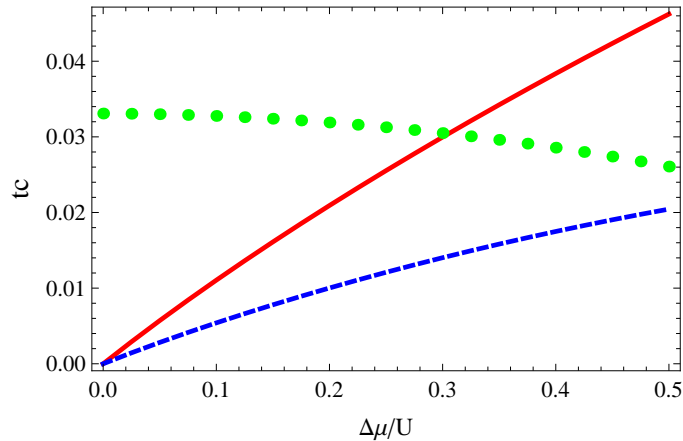


图 3-4 三角超晶格中玻色子系统的临界跃迁值：绿色的点表示第一个莫特态，而红色和蓝色的线分别表示第一，第二个密度波态的顶点

Fig.3-4 Critical hopping t_c of Bosons on triangular superlattice system: the green dot represents the first Mott lobe while the red and blue line represent the first and second CDW lobe respectively

的增大，系统的莫特绝缘态的区域在减少，而密度波态的区域在增大。

笼壁超光晶格中的相图的计算和在三角超光晶格中基本相同，我们仍然需要将系统分成三个子系统进行计算，所得到系数的计算和在三角晶格中也是一样的。如图 3-5 所示，图中从左到右的三幅图中我们设 $U = 4$ ，第一幅图表示的是普通的笼壁晶格，第二幅图 $\Delta\mu = 1$ ，第三幅图中 $\Delta\mu = 2$ 。在所有的相图中，我们把系统的格点上的排斥势能 U 固定在 4，从左到右我们逐渐增大系统的子系统 A 和 B(C) 之间的化学势之差 $\Delta\mu$ ，从 0 到 1 最后到 2，我们可以发现随着系统的 $\Delta\mu$ 的增大，系统的密度波态逐渐增大，而莫特绝缘态逐渐减小。而固体态的融化到超流态的相变都是二阶相变，它可以用粒子和空穴的激发理论来描述。当系统的粒子填充数小于 $1/3$ 时，基于能量最低原理，粒子会优先占据更深的子系统 A 上的格点。此时，系统的粒子只能在子系统 A 的格点上通过二阶的跃迁来实现超流，这种情况下，系统就像是一个由 A 格点组成的四方晶格系统，而当系统的填充数正好是 $1/3$ 时，子系统 A 就会被全部填满，此时再要往里面添加粒子就需要添加到 B 或 C 的晶格上，这样就需要一定的能量，因此此时就会形成一个能隙的态，这就是密度波态，而系统的相图的尖点的激发则是通过增大跃迁振幅来融化固体态的，由于系统的 $\Delta\mu$ 越大时，就相当于子系统 A 也就越深，此时融化需要更大的跃迁振幅才能实现。因此当增大 $\Delta\mu$ 时，密度波态区域会增大。而当系统的填充数为 $1/3$ 到 1 之间时，此时，系统的子系统 A 被填满，其余的粒子被填充在子系统 B 和 C 上，可以自由的跃迁，因此，此时，系统表现的就像是由 B 和 C 组成的一维系统，由子系统 A 的格点隔开。我们的二阶结果和 QMC 数

值模拟的结果的误差依然很小，但是比立方晶格的时候要大，这是因为在笼壁晶格的时候，三阶微扰对于相图的影响也很大^[81]。因此如果要得到更精确的结果，我们需要用process-chain的方法将结果计算到更高阶，在第四章的时候，我们会提供这种思路。

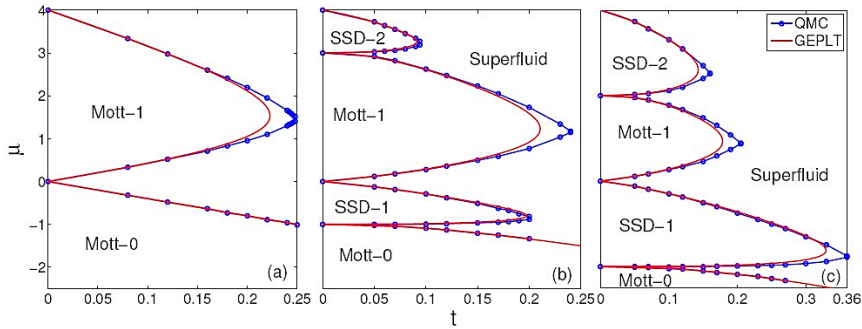


图 3-5 笼壁超光晶格中玻色子系统的量子相图

Fig.3-5 the quantum phase diagram for Bosons on Kagome superlattice system

3.4 笼壁超光晶格中的各向异性的超流

在笼壁超晶格中，由于人为的破坏了平移对称性，导致 $C6$ 对称性也遭到破坏，因此可以预见在系统中存在各向异性的超流。在这里，我们运用QMC的数值算法来模拟系统，计算系统中不同参数的超流密度。图 3-6中QMC的模拟参数为 $\beta = 300$ 、 $L = 9$ 、 $U = 4$ 、 $t = 0.1$ 、 $\rho_s^+ = (\rho_s^x + \rho_s^y)/2$ 、 $\rho_s^x(\rho_s^y) = \langle W_x^2(W_y^2)/(4\beta t) \rangle$ ，其中 $W_x(W_y)$ 是 $x(y)$ 方向的回转数(winding number)。

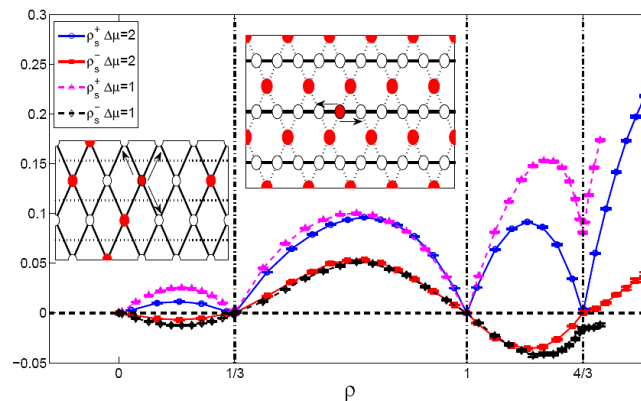


图 3-6 笼壁超光晶格中玻色子系统的超流密度

Fig.3-6 Superfluid density of Bosons on Kagome superlattice

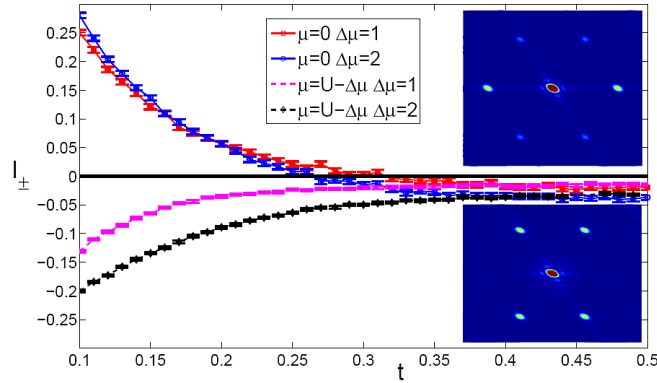


图 3-7 各向异性强度参数随跃迁的变化

 Fig.3-7 Anisotropy parameter I_{\pm} of the superfluid phases vs t

图 3-6 显示随着粒子数密度的变化, x 和 y 方向的超流密度交替领先。首先来分析当粒子的密度小于 $1/3$ 时的情况, 由于子系统 A 更加的深, 因此此时粒子填充在子系统 A 的格点上, 此时粒子只能在 A 系统的格点之间跃迁, 系统可以等效的看成是一个菱形的晶格系统, 因此 y 方向的超流密度大于 x 方向的超流密度。当系统的填充数密度大于 $1/3$ 时, A 子系统上的格点已经填满, 多余的粒子填充在 B, C 的格点上, 此时, 粒子倾向于在子系统 B, C 上移动, 因此 x 方向的超流密度大于 y 方向的超流密度。图 3-7 显示当跃迁项大到某一定值之后, 系统的各向异性参数倾向于趋近某一个非零的负值。 $\mu = U - \Delta\mu$ 时, 系统处于 Mott-1 和 SSD-2 态之间, 可以看到, 增大跃迁项之后, 系统可以连续的调制到从 x 方向领先到 y 方向领先, 因此, 人们必须把超流密度当做一个矢量来理解。

而在弱耦合区域, 也就是跃迁振幅 t 远远大于格点上相互作用势能 U 和格点间化学势之差 $\Delta\mu$ 的时候, 系统此时处于一种深度超流的状态。由于子系统 A 中的格点比子系统 B 和 C 中要深, 此时子系统 A 格点上的密度要大于子系统 B 和 C 中的格点。此时, 系统的超流的各向异性的特性与 $\Delta\mu$ 的大小无关。为了研究此时各向异性的超流的特性, 我们引入一个可以显示这种各向异性的特性的参数 ($I_{\pm} = \rho_s^x - \rho_s^y / (\rho_s^x + \rho_s^y)$)。从图 3-7 可以看出, 在跃迁振幅 t 不大时, 化学势为零和化学势等于 $\mu = U - \Delta\mu$ 时的 I_{\pm} 分别为正和负。如果持续的增大 t , 会发现这两个值都会最终等于某一个小的负值。这表明, 在化学势为零的时候, 可以通过改变系统的跃迁振幅 t , 来实现系统的各向超流密度的反转。人们也曾在 $L_x \neq L_y$ 长方形晶格中发现过类似的现象^[91]。

一般来说实验观察从莫特态到超流的相变是通过飞行时间实验(TOF)图像。我们指出这种各向异性的超流现象超流的超流现象也可以通过飞行时间实验的图像的计算公式。所谓的飞行时间实验的方法。就是指突然将光晶格的高度降

低到零，然后让光晶格中的粒子自由的运动足够长的时间，然后用实验仪器去探测这些粒子的位置。由于粒子飞行的时间足够长，所以它们之前在光晶格中的位置信息可以忽略，因此通过探测这些位置，就可以知道系统中粒子的动量信息。通常在莫特绝缘态中，由于原子的位置完全固定，所以它们动量信息完全不固定，因此物质波之间不产生干涉，所以通常得到的图像是一个高斯分布的图像。而在超流态中，由于原子的位置完全不确定，所以它们的动量完全确定，因此物质波之间会产生干涉，所以在超流态中会得到一个干涉的图样^[10]。

飞行时间实验图像不仅能够显示系统出现了各向异性的超流，而且通过它人们甚至可以分辨不同方向领先的超流。由于飞行的时间足够长，粒子的位置实际上表示了粒子在原来的光晶格中的速度，因此可以通过这种末态粒子的位置信息来获得原来光晶格粒子的动量信息。因此，飞行时间实验的图像的分布可以通过粒子数 $n(k)$ 来表示：

$$n(k) = \int d^3\vec{r}d^3\vec{r}' \exp\left[ik(\vec{r} - \vec{r}')\right] \rho(\vec{r}, \vec{r}') \quad (3-23)$$

其中

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}') \rangle \quad (3-24)$$

而如果我们子系统A和子系统B(或C)的深度相差不大，则我们可以认为他们具有相同的瓦尼尔函数，因此

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}') \hat{a}_i \quad (3-25)$$

由此我们可以得到

$$n(k) = |w(k)|^2 \sum_{i,j} \exp\left[ik(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\right] \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle \quad (3-26)$$

如果用一个高斯函数来近似的代替瓦尼尔函数，则它的傅里叶变换 $w(k)$ 也是一个高斯函数。如果我们用QMC计算出所有的 $\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle$ ，则可以给出系统的TOF图像。如图3-7所示，对于上下两幅不同的TOF图像，QMC模拟的参数为 $\mu = 0.7(1.7)$ 、 $\Delta\mu = 2$ 、 $U = 4$ 、 $t = 0.15$ 、 $\beta = 200$ 、 $L = 9$ 。从图中可以看出，实验上是可以飞行时间实验来分辨不同的各向异性的超流。

3.5 本章小结

在本章中，我们给出了阻错光晶格系统在实验上实现的建议和数值模拟，并用广义的朗道有效势理论和量子蒙特卡罗的方法来计算了系统的相图。该系统中不仅出现了莫特绝缘态，也由于人为的破坏了平移对称性而出现了密度波

态。进一步的研究表明笼壁超光晶格系统中出现了各向异性的超流，且随着系统的化学势的变化，在不同方向的超流密度交替领先。这表明必须把超流当做是一个张量来看待，而不是一个标量。我们的研究为将来阻错超光晶格的实验研究打下了理论基础并提供了参考数据。

第4章 周期性调制的S-波散射长度对光晶格中玻色子量子相变的影响

4.1 引言

前面介绍过光晶格中玻色子系统的各种参数可以很容易的连续的细致的调节,因此它可以当做是一个完美的量子模拟器。为了模拟更复杂的系统,人们就会想办法调制光晶格使其变得更加复杂,除了上两章中介绍的从几何形状上去调制它以外,最近另一种周期性的调制某个参数也被人们越来越多的关注,比如最早由Oldenburg 的小组^[92]提出的给光晶格加一个周期性的外场,这种随时间周期性变化的系统,可以在外场频率足够大的时候近似的用一个跟时间无关的哈密顿量来描述,这个观点后来在实验上被证实^[93, 94]。现在这项技术被用来驱动系统从超流态到莫特绝缘态的相变^[54],模拟阻错晶格或产生阿贝尔规范场和非阿贝尔规范场^[56, 95-97]。而实验上人们也希望用这种技术在光晶格中来实现对Hofstadter 或Harper哈密顿量^[98, 99]的模拟。

另一种周期性调制光晶格的方法是周期性的调制光晶格的S-波散射长度^[100, 101],这个可以在实验上在Feshbach共振附近实现^[102]。通过给外加磁场一个周期性的振动,从而使得系统中原子的相互作用势能出现一个周期性的调制项,这个周期性的调制项将会极大的改变系统的性质。比如在光势阱中的BEC 中引入该调制后,系统出现了一系列新的现象,比如非线性的动力学现象^[103]。因此,S-波周期调制是一个用来制造更多量子模拟器的工具。

在本章中,我们运用类似Oldenburg小组提出的方法,和Luis教授的小组^[65]分别得到了相同的等效哈密顿量,然后运用朗道有效势理论来分析二维正方晶格和三维立方晶格中玻色子系统的相图以及它们的临界点,得到了一个类似于玻色-哈伯德模型的另一种等效哈密顿量,QMC数值模拟的结果证明新的等效哈密顿量在相边界附近是一种很好的近似。最后,我们用process-chain算法把朗道有效势理论计算到了高阶,并得到了S-波周期性调制的系统中的精确相图。进一步的研究发现,当S-波周期性调制的振幅增大的时候,系统将会表现出与玻色-哈伯德系统截然不同的性质。

4.2 周期性调制系统的一些基本概念

但是，在介绍S-波周期性调制的光晶格这种具体的模型之前，让我们讨论几个有关周期性调制的光晶格系统的几个具体的问题。这些问题是理解周期性振动光晶格的关键。比如：周期性调制的光晶格系统是一个动态的系统，在什么情况下它可以看成是准平衡态？比如周期性调制的光晶格中玻色子系统也存在玻色-爱因斯坦凝聚态吗？由于它的能级是随时间周期性变化的，那么它的凝聚到底是指凝聚在什么态上？

在这一节，我们通过引述前人的研究成果来回答这些问题，在这里要说明的是，周期性调制的光晶格系统是一个很新的概念，在这当中的很多概念人们至今仍然不是很清晰，但是尽管如此，我们仍然可以从之前的很多成果中得到很多有益的启发。

第一眼看上去，周期性调制的光晶格是一个典型的非平衡态系统，但实际上这可能不正确，因为对于周期性调制的量子系统来说，Floquet能级的粒子占有数是不会随时间变化的，因此如果从Floquet能级这个角度来说，是有可能将系统当作平衡态的。

前面的章节已经向读者介绍过玻色-爱因斯坦凝聚的概念：是指玻色子在温度降低到临界温度以下的时候，会有大量的宏观可见的玻色子占据在系统的基态。刚开始人们可能会认为这个概念并不适用于周期性调制的系统，毕竟该系统中不存在静态的能级。但是Floquet指出，在这种周期性调制的系统中存在着一种Floquet能级，该能级上的粒子数不随时间变化，后来的更多的研究表明^[104]，这种Floquet能级在很多方面和静态能级相同。该理论表明，薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}_0(t) |\psi(t)\rangle \quad (4-1)$$

拥有Floquet的解

$$|\psi_\alpha(t)\rangle = |\alpha(t)\rangle e^{-i\varepsilon(\alpha)t/\hbar} \quad (4-2)$$

该解中的量子数 α 满足以下条件：Floquet函数 $|\alpha(t)\rangle$ 与非微扰的哈密顿量 $\hat{H}_0(t)$ 具有相同的周期，即

$$|\alpha(t)\rangle = |\alpha(t+T)\rangle \quad (4-3)$$

而物理量 $\varepsilon(\alpha)$ 描述了Floquet能级随时间变化的相位，和在普通的哈密顿量中能量对薛定谔能级的随时间变化的相位相同，所以我们称它为赝能量。对每一个含时薛定谔方程（4-1）来说，它的任意一个解 $|\psi(t)\rangle$ 满足：

$$|\psi(t)\rangle = \sum c_\alpha(t) |\psi_\alpha(t)\rangle \quad (4-4)$$

将上式带入式(4-1)中我们可以得到:

$$\frac{\partial c_\alpha(t)}{\partial t} = 0 \quad (4-5)$$

因此 $c_\alpha(t)$ 与时间无关, 可以被记为 c_α 。所以我们可以得到一个很重要的关系式, 即Floquet能级的粒子占有数是不随时间变化的。因此如果从绝热的开始逐步的加大调制的幅度, 人们可以从调制后的态分布推导出系统在未被调制之前是如何分布的。

但是在开始寻求Floquet能级的玻色-爱因斯坦凝聚之前, 让我们来重复一下爱因斯坦对普通玻色子系统的推导过程: 考虑到理想的玻色子气体, 其粒子总数 N 远大于1, 而粒子的总能量为 E_{tot} , 我们假设第 i 个态的简并度为 g_i , 本征能量为 E_i 。则可以得到两个限制条件:

$$\sum_i n_i = N \quad (4-6)$$

$$\sum_i E_i n_i = E_{tot} \quad (4-7)$$

对于每一组分布 n_i 来说, 还可以得到系统的总状态数

$$\Omega = \prod_i \binom{n_i + g_i - 1}{n_i} \quad (4-8)$$

由于对于一个平衡态系统来说, 它的熵总应该取最大值, 即要求系统的状态数取极值, 于是问题变成了一个有限制条件的极值问题, 对于这种问题我们可以用拉格朗日极值方法来处理。引入拉格朗日算子 α 和 β 后可以得到极值条件为:

$$\delta \left(\Omega - \alpha \sum_i n_i - \beta \sum_i E_i n_i \right) = 0 \quad (4-9)$$

经过一番复杂的计算, 可以得到粒子的分布为:

$$\frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{\exp(\beta E_i + \alpha) + 1} \quad (4-10)$$

并可以得到 $\alpha = -\mu/k_B T$, $\beta = -1/k_B T$ 。得到该分布后, 爱因斯坦发现当温度低于某个临界值的时候, 系统会出现玻色-爱因斯坦凝聚。

现在我们尝试着在周期性调制的量子系统中重复爱因斯坦所做的工作。第一个限制条件很容易找到, 因为每一个Floquet能级上的粒子占有数不随时间变化, 所以, 所有的Floquet能级的粒子占有数的总和应该是守恒的。但是困难在于寻找第二个限制条件, 因为在该系统中, 不存在静态的能级。人们可能想到用赝能量来代替能量, 但是更深的探究表明, 这并不是一个正确的想法。我们

下面的介绍会使读者对赝能量有一个更深的理解

Floquet函数 $|\alpha(t)\rangle$ 和相应的魔能量 $\varepsilon(\alpha)$ 正好是某个Floquet哈密顿量的特征函数和特征能量:

$$\hat{\mathcal{H}}_0(t)|\alpha(t)\rangle = \varepsilon(\alpha)|\alpha(t)\rangle \quad (4-11)$$

而该Floquet哈密顿量为

$$\hat{\mathcal{H}}_0(t) = \hat{H}_0(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (4-12)$$

为了解决非微扰哈密顿量 $\hat{\mathcal{H}}_0(t)$ 的本征值问题(4-11), 我们需要引入扩展的希尔伯特空间。在该空间中, 时间 t 被认为是一个协变量, 比如两个周期为 T 的函数 $|u_1(t)\rangle$ 和 $|u_2(t)\rangle$, 在普通的希尔伯特空间中, 它们的标量积为 $\langle u_1(t)|u_2(t)\rangle$, 但是在扩展的希尔伯特空间中需要做一些修正

$$\langle\langle u_1(t)|u_2(t)\rangle\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle u_1(t)|u_2(t)\rangle \quad (4-13)$$

在扩展的希尔伯特空间中, 本征值问题(4-11)可以很容易的在粒子数表象下求出来:

$$| \{n_i\}, m(t) \rangle \rangle = e^{im\omega t} \prod_i \left[e^{-\frac{iA g(n_i)}{\hbar\omega} \sin(\omega t)} |n_i\rangle_i \right] \quad (4-14)$$

而对应的Floquet能量 (赝能量) 为

$$\varepsilon(\{n_i\}, m) = \sum_i f(n_i) + m\hbar\omega \quad (4-15)$$

由于Floquet函数要求具有周期性, 所以量子数 m 要求为整数。这样的话赝能量谱(4-15)在能量轴上周期性的重复, 就像是固体物理中的布里渊区一样, 能级在不同的布里渊区重复的出现。这也就是说一个Floquet能级对应多个赝能量, 显然这样的赝能量不满足任何的限制条件, 但是每一个Floquet能级都会有一个平均能量, 而这个平均能量一般来说是守恒的。这样我们就可以得到新的限制条件:

$$\sum_{\alpha} n_{\alpha} = N \quad (4-16)$$

$$\sum_{\alpha} \bar{E}_{\alpha} n_{\alpha} = E_{tot} \quad (4-17)$$

有了这两个限制条件之后, 重复上面的过程, 就可以得到一个粒子数关于Floquet能级的分布函数:

$$\frac{n_{\alpha}}{g_{\alpha}} = \frac{1}{\beta \bar{E}_{\alpha} + \gamma} \quad (4-18)$$

式中, g_{α} 表示具有相同的平均能量 \bar{E}_{α} 的Floquet能级的个数。而参数 β 和 γ 不再与

温度相关，而是与周期性调制的外场有关，但是我们也把它们写成和普通玻色子类似的情况，则可以得到：

$$\begin{aligned}\beta &= \frac{1}{k\Theta} \\ \gamma &= \frac{\nu}{k\Theta}\end{aligned}\quad (4-19)$$

上面两式中， Θ 是一个与温度作用类似的量，我们称之为类温度，而 ν 则是周期性的调制引起的化学势。同样，当 Θ 低于某个临界值的时候，系统也会发生凝聚，与普通的玻色子系统不同的是，粒子会凝聚在平均能量最低的Floquet能级上。上面的统计也是人们可以把周期性调制的量子系统当做是一个等效的平衡态系统的有利证据。如果一个系统的哈密顿量可以写成 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$ ，当 $\hat{H}_1(t)$ 非常小处于微扰范围内时，Floquet能级的排序与原来的能级排序相同，系统此时仍然凝聚在由原来的基态能级演化而来的Floquet能级上，但是当 $\hat{H}_1(t)$ 过大时，这一结论不再成立。

下面我们来介绍人们在实验上对上面讲述的概念的证实。虽然在理论上它依然面临着某些争论，但是在意大利的Pisa的实验小组的实验却支持上述的结论^[54]。为了更好的理解他们的实验，这里首先来介绍它们在实验上的准备。

他们的实验是在周期性晃动（shaken）的光晶格中进行的。因此我们首先介绍在实验上怎样去制备这种光晶格，以一维的系统为例（二维三维的系统可以很容易的推广）。一维的普通的光晶格就是两束相对传播的激光干涉形成的驻波，这两束激光在频率振幅等各方面都要相同，通常制备这两束激光是让一束激光通过分光仪变成两束，而在这个过程中我们可以通过声光调制器使两束光之间有一个小的随时间变化的频率差 $\Delta\nu(t)$ ，这时，两束光的电场的叠加可以写成：

$$\begin{aligned}E &= \cos\left[k_L x + \left(\omega + \frac{\Delta\nu(t)}{2}\right)t\right] + \cos\left[-k_L x + \left(\omega - \frac{\Delta\nu(t)}{2}\right)t\right] \\ &= 2\cos(\omega t)\cos\left[k_L x + \frac{\Delta\nu(t)t}{2}\right]\end{aligned}\quad (4-20)$$

上式可以理解为一个空间的光晶格以速度 $2\pi\frac{\Delta\nu(t)\lambda}{2}$ 运动，可以得到光晶格的势能为：

$$V_{lab}(x, t) = \frac{V_0}{2} \cos[2k_L(x - X_0(t))]\quad (4-21)$$

其中

$$X_0(t) = 2\pi\frac{\lambda}{2} \int_0^t \Delta\nu(\tau)d\tau\quad (4-22)$$

而下角标 lab 表示的是在实验室的参考系中。从而可以得到实验室中的哈密顿

量为

$$\hat{H}_{lab} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{lab}(x, t) \quad (4-23)$$

进行坐标转换将其转换到与晶格相对静止的参考系中得到哈密顿量为[58]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) \quad (4-24)$$

其中

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{V_0}{2} \cos(2k_L x) \quad (4-25)$$

$$\hat{H}_1(t) = -m \frac{\partial^2 X(t)}{\partial t^2} \quad (4-26)$$

需要在这里指出的是, $\hat{H}_1(t)$ 最终的具体形式取决于我们之前通过声光调制器给两束光的频率差的具体形式, 在理论和实验研究中, 人们通过改变它的具体形式得到了在自然界中不存在的许多新的哈密顿量, 从而丰富了人们对量子关联系统的控制手段。而在Pisa的实验小组中, 他们将 $\Delta v(t)$ 的形式取为:

$$\Delta v(t) = \begin{cases} 0 & \text{if } t < 0 \\ \Delta v_{max} \sin(\omega t + \phi) & \text{if } t > 0 \end{cases} \quad (4-27)$$

于是我们可以得到 $\hat{H}_1(t)$ 的具体形式为

$$\hat{H}_1(t) = mL\omega^2 \cos(\omega t + \phi) \quad (4-28)$$

其中

$$L = \frac{\Delta v_{max}}{2\omega} \quad (4-29)$$

为了简便起见, 将初始相位 ϕ 设为零, 并令

$$K = mL\omega^2 \quad (4-30)$$

则可以得到系统的哈密顿量为:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{V_0}{2} \cos(2k_L x) + K \cos(\omega t) x \quad (4-31)$$

将上面的哈密顿量进行二次量子化后我们可以得到(二次量子化的步骤和第一章中介绍的基本相同):

$$\hat{H} = -J \sum_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + K \cos(\omega t) \sum_i i \hat{n}_i \quad (4-32)$$

Pisa实验小组的实验中粒子的密度很低, 因此可以近似的看做是理想气体, 即 $U = 0$ 。此时运用Floquet理论我们可以发现, 系统的跃迁项等效为

$$J_{eff} = JJ_0 \left(\frac{K}{\hbar\omega} \right) \quad (4-33)$$

其中 J_0 是零阶的bessel函数。而我们知道系统的色散关系为:

$$E = 2J_{eff} \cos(kd) \quad (4-34)$$

式中 d 为系统的晶格常数。由该色散关系可以知道，当 $J_{eff} > 0$ 时，粒子凝聚在 $k = 0$ 的态上，而当 $J_{eff} < 0$ 时，粒子凝聚在 $k = \pm\pi$ 的态上。在图4-1的TOF (time of flight) 干涉图样中，图(a)是调制振幅为零，图(b)中调制振幅为 $K/\hbar\omega$ 为1.5，此时系统的等效跃迁振幅仍然为正，因此粒子仍然凝聚在 $k = 0$ 的态上，而在图(c)中，系统的外加调制振幅为4。此时系统的等效跃迁振幅为负，因此干涉图样显示粒子凝聚在 $k = \pm\pi$ 的态上。上述实验为周期性调制系统的关于Floquet能级的凝聚提供了一个有力的证据。

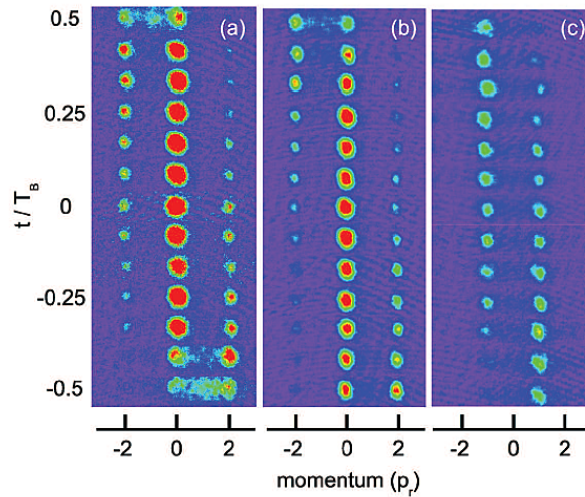


图 4-1 第一布里渊区内系统的飞行时间实验干涉图样^[58]

Fig.4-1 TOF interference pattern of the first Brillouin zone^[58]

总结一下这一节中介绍的内容，通过前人的理论和实验研究成果我们可以发现，周期性调制的系统用Floquet能级的角度来看，可以把它看成是一个稳态系统。如果适当的调节系统的参数，原子会凝聚在平均能量最低的Floquet能级上。同时上面的论述也告诉我们，如果给系统一个很小的周期性调制，此时，系统的赝能量的能级可以看做是从未加调制的系统的基态绝热的演化而来，此时， $m = 0$ 时赝能量就和系统的平均能量相同。而如果所加的周期性调制的振幅很大，那么系统的平均能量和赝能量之间的关系就可能完全不同。

在下节中，我们将会将前人的研究成果应用在一种全新的周期性调制系统上-S波调制的光晶格上，看看它是怎样的改变系统的临界性质的。

4.3 伴随S-波周期性调制的光晶格中的玻色子系统的哈密顿量

在这一节中，我们将会来讨论描述系统的哈密顿量。由于系统中存在一个随时间的调制项，因此系统的哈密顿量应该是一个随时间周期性变化的量，我们首先会来探讨这种随时间周期性变化的哈密顿量。然后用Floquet理论得到了一个等效的不含时的哈密顿量，在周期时间平均的情况下，这种等效的哈密顿量可以很好的来描述系统。最后我们探讨了这种等效过程的限制条件。

4.3.1 与时间相关的哈密顿量

前面讲过在光晶格中的玻色子系统中，人们可以通过Feshbach共振来调节系统的格点上原子的相互作用的势能，一般来说，如果只考虑两个原子之间的接触相互作用势能，那么它正比于Feshbach共振中的S-波散射长度，也就是 $U \propto a_s$ 。而在磁场B中，Feshbach共振附近的S-波散射长度可以表示为

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta'}{B - B_0} \right) \quad (4-35)$$

上式中 a_{bg} 是系统的背景散射长度（ V_{bg} 的散射长度）， B_0 是Feshbach共振点，而 Δ' 是共振的宽度。我们考虑一个随时间周期性变化的磁场

$$B(t) = B_{av} + \delta B \cos(\omega t) \quad (4-36)$$

上式中 ω 是调制的频率，把这个式子代入到式（4-35）中，在 $\delta B \ll |B - B_0|$ 时，对 δB 进行展开，并保留到一阶项，我们可以得到系统的S-波散射长度为

$$a(t) = a_{av} + \delta a \cos(\omega t) \quad (4-37)$$

这其中

$$a_{av} = a_{B_{av}} \quad (4-38)$$

和

$$\delta a = \frac{a_{BG} \Delta' \delta B}{(B_{av} - B_0)^2} \quad (4-39)$$

由于系统的格点上原子的相互作用势能正比于S-波散射长度，由式（4-37）可知，可以用 $U + A \cos(\omega t)$ 来描述相互作用势能。

其次，我们仍然想只考虑系统的最低能带的情形，照理说这在周期性调制的系统中是不可能成立的，因为会存在多光子的协助跃迁效应，系统总会存在能带间的跃迁。但是如果限制 $\hbar\omega \ll \Delta$ ，其中 Δ 是系统最低的能带的带隙，那么可以近似的认为系统的能带间的跃迁效应很小，可以忽略。而系统的能隙可以

用Mathieu方程来求解，对于深的光晶格^[58]

$$\Delta/E_R \approx V_0/(2E_R) \quad (4-40)$$

而对于浅的晶格，可以得到：

$$\Delta/E_R \approx 2\sqrt{V_0/E_R} - 1 \quad (4-41)$$

其中 E_R 是系统的反冲能量。图 4-2给出了系统的能隙与晶格深度之间的关系，在实验中，如果选择晶格的深度为 $10E_R$ 左右，最低能带的能隙为 $4.572E_R$ ，而可以选择驱动频率 $\hbar\omega/E_R$ 在0.1左右。这时我们可以认为 $\hbar\omega \ll \Delta$ 这个条件是近似成立的。也就是说在这种情况下，我们可以只考虑最低带的情况。

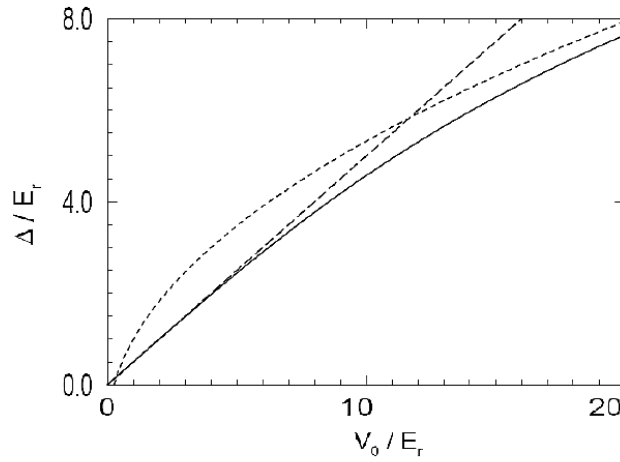


图 4-2 系统的最低的两个能带的能隙^[58]

Fig.4-2 The energy gap between the lowest two bands^[58]

如果只考虑格点上的原子的相互作用和最近邻格点之间的跃迁，那么伴随S-波周期性调制的光晶格系统可以用如下的随时间变化的哈密顿量来描述：

$$\hat{H}(t) = \sum_i \left\{ \frac{1}{2} [U + A \cos(\omega t)] (\hat{n}_i^2 - \hat{n}_i) - \mu \hat{n}_i \right\} - \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (4-42)$$

这里 \hat{a}_i^\dagger , \hat{a}_j 分别代表系统的玻色子的产生和湮灭算符， $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ 代表玻色子的粒子数算符， t_{ij} 表示格点*i*和*j*之间的跃迁矩阵，局域的随时间变化的项取决于系统的粒子之间的排斥势 U 和化学势 μ 。在该哈密顿量中，系统的S-波的周期性振动的振幅用 A 来描述，振动频率用 ω 来描述。由上面的哈密顿量可以知道，振动项是粒子占有数算符的二次函数，而对于光晶格的周期性振动则只是一次函数^[58]。

4.3.2 等效的不含时的哈密顿量

上一节中得到了系统含时的哈密顿量，但是因为含时很难去直接的处理它，因此这一节我们尝试运用Floquet理论得到它的等效的不含时的哈密顿量。为了更加广泛的说明问题，将哈密顿量4-42) 简要的记为

$$\hat{H}(t) = \sum_i \left[f(\hat{n}_i) + Ag(\hat{n}_i) \cos(\omega t) \right] - \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (4-43)$$

在上式中，不随时间变化的局域项为：

$$f(\hat{n}_i) = \frac{U}{2} (\hat{n}_i^2 - \hat{n}_i) - \mu \hat{n}_i \quad (4-44)$$

而随时间变化的局域项为

$$g_i(\hat{n}_i) = \frac{1}{2} (\hat{n}_i^2 - \hat{n}_i) \quad (4-45)$$

下面的分析针对范围更广的哈密顿量 (4-43)，对所有的 $f(\hat{n}_i)$ 和 $g(\hat{n}_i)$ 算符都成立。为了寻找一个合适的基来描述该系统，我们首先来看包含所有的局域项的非微扰的哈密顿量

$$\hat{H}_0(t) = \sum_i \left[f(\hat{n}_i) + Ag_i(\hat{n}_i) \cos(\omega t) \right] \quad (4-46)$$

该哈密顿量仍然具有周期性

$$\hat{H}_0(t) = \hat{H}_0(t + T) \quad (4-47)$$

周期为 $T = 2\pi/\omega$ 。所以我们可以对上述系统运用Floquet理论。

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{H}(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (4-48)$$

在扩展的希尔伯特空间内，我们求得它相应的矩阵元为：

$$\hat{\mathcal{H}}_{\{n'_i\}, m'; \{n_i\}, m} = \langle \langle \{n'_i\}, m' | \hat{\mathcal{H}} | \{n_i\}, m \rangle \rangle \quad (4-49)$$

根据式(4-43)和(4-13)–(4-15)，这些矩阵元为

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\{n'_i\}, m'; \{n_i\}, m} &= \delta_{m, m'} \left[\sum_i f(n_i) + m\hbar\omega \right] \delta_{\{n'_i\}, \{n_i\}} \\ &\quad - \sum_{ij} t_{ij} \langle \{n'_i\} | \hat{a}_i^\dagger J_{m-m'}(G(\hat{n}_i, \hat{n}_j)) \hat{a}_j | \{n_j\} \rangle \end{aligned} \quad (4-50)$$

其中 $J_{m-m'}$ 表示第一类的Bessel函数，而且

$$G(\hat{n}_i, \hat{n}_j) = \frac{g(\hat{n}_j) - g(\hat{n}_j - 1) + g(\hat{n}_i) - g(\hat{n}_i + 1)}{\hbar\omega} \quad (4-51)$$

现在我们来考虑系统的驱动频率 ω 的限制条件。一方面，系统的驱动频率不能太大，激发能量 $\hbar\omega$ 必须远小于系统的最低能隙，所以可以只考虑系统的最低能

带，另一方面， $\hbar\omega$ 必须远远大于系统的参数 t_{ij} 和 U ，这样的话，能级 $m \neq m'$ 之间的跃迁就被很大程度上压制了，因此，只有 $m = m'$ 的能级需要被考虑，所以原来的与时间相关的哈密顿量可以被映射到与时间无关的哈密顿量上

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_i f(\hat{n}_i) - \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger J_0(G(\hat{n}_i, \hat{n}_j)) \hat{a}_j \quad (4-52)$$

根据式(4-51)和(4-52)^[65]，最终可以得到

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_i \left[\frac{U}{2} \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu \hat{n}_i \right] - \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger J_0\left(\frac{A}{\hbar\omega}(\hat{n}_j - \hat{n}_i)\right) \hat{a}_j \quad (4-53)$$

如果我们把相同的量子数 m 标示的Floquet态称为一个Floquet带，那么式(4-53)就表示了系统的不同的Floquet态之间的耦合作用。Eckardt和Martin在2005年的一篇文章中详细的研究了^[92]在怎样的情况下我们可以忽略不同的Floquet带之间的耦合。他们指出，可以通过探测系统的能级免交叉来观测这种耦合，发现在条件下 $\hbar\omega \gg U, J$ 满足时，不同的Floquet带之间的耦合可以忽略，从而只需要考虑其中的一个带就行。这时， $\hat{H}_{\text{eff}} - i\hbar\omega$ 在扩展的希尔伯特空间中和 $\hat{H} - i\hbar\omega$ 有同样的矩阵元，因此可以将原哈密顿量等效到不含时的哈密顿量 \hat{H}_{eff} 。在系统的格点深度为 $10E_R$ 时，系统的跃迁振幅可以通过在第一章中介绍的方法来计算 $J \approx 0.01E_R$ ，而 U 的大小可以通过调节系统的S-波散射振幅使得它远远的小于 $\hbar\omega$ 。因此在实验中，我们确实可以找到满足限制条件的 $\Delta \gg \hbar\omega \gg U(J)$ 的驱动频率，经过计算，系统的驱动频率应该大概为几千个赫兹量级^[58, 59]。根据文献^[98]，我们可以把对S-波的周期性的调制看成是一种对跃迁振幅 t 的一种重整化，与对光晶格的周期性调制不同，这里得到的有效跃迁项是跃迁格点 i 和 j 之间的粒子数之差的Bessel函数。

4.4 伴随S波周期性调制光晶格中玻色子系统的朗道有效势理论

经过前面的讨论，我们已经得到了描述伴随S波周期性调制的光晶格中玻色子的一个不含时的等效哈密顿量。这个等效哈密顿量其实是从一个周期内时间平均的角度来描述系统，这一节主要讨论系统的朗道有效势理论计算的相图以及对系统的相图的顶点的数据分析得到的新的哈密顿量，我们也会运用其他各种解析方法和量子蒙特卡罗模拟的方法来验证朗道有效势方法在处理该系统的有效性。

为了描述系统从莫特绝缘态到超流态的二阶相变，我们运用在场论中用来描述热力学相变的方法，首先引入和产生湮灭算符耦合的流，得到一个含流的

哈密顿量:

$$\hat{H}_{\text{eff}}(j^*, j) = \hat{H}_{\text{eff}} + \sum_i (j^* \hat{a}_i + j \hat{a}_i^\dagger) \quad (4-54)$$

然后来计算系统的基态能量，注意在零温的时候，系统的基态能量和自由能重合。在系统的跃迁振幅 $t = 0$ 的时候，系统的能量为 $F_0 = N_s f(n)$ ，这其中 N_s 表示系统的总格点的数量，其中 $f(n) = Un(n-1)/2 - \mu n$ 。要使系统的每个格点具有 n 个原子，系统的化学势必须满足 $(n-1) < \mu/U < n$ 。我们可以在此基础上运用微扰论来计算系统的自由能。首先把自由能对源进行展开得到

$$F(j, j^*; t) = F_0 + N_s \left(\sum_{p=1}^{\infty} c_{2p}(t) |j|^{2p} \right) \quad (4-55)$$

其中系数 $c_{2p}(t)$ 可以表示为对跃迁振幅 t 的泰勒展开

$$c_{2p}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-t)^n \alpha_{2p}^{(n)} \quad (4-56)$$

由系统的自由能对源的导数可以得到系统的序参量

$$\psi = \frac{1}{N_s} \frac{\partial F}{\partial j^*} \quad \psi^* = \frac{1}{N_s} \frac{\partial F}{\partial j} \quad (4-57)$$

对自由能做勒让德变换得到

$$\Gamma = F/N_s - j\psi^* - j^*\psi \quad (4-58)$$

把式 (4-55) 带入到上式中可以得到有效势对源的展开为

$$\Gamma = F_0/N_s - \frac{1}{c_2(t)} |\psi|^2 + \frac{c_4(t)}{c_2(t)} |\psi|^4 + \dots \quad (4-59)$$

根据朗道对称破缺理论，系统的相变发生在二阶系数为零，也就是 $\frac{1}{c_2(t)} = 0$ 的时候。也就是说，如果只关注系统的相变，则只需要计算系统的二阶系数。在后面我们从低阶开始到高阶逐步分析各阶的结果对系统的影响。发现新系统中展示了很多在普通的玻色-哈伯德模型中完全不同的性质。

4.4.1 一阶结果

根据前面的章节的介绍我们只需要计算自由能展开的二阶系数

$$c_{2p}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-t)^n \alpha_{2p}^{(n)} \quad (4-60)$$

如果只计算到一阶系数的话可以得到

$$\alpha_2^{(0)} = \frac{n+1}{f(n) - f(n+1)} + \frac{n}{f(n) - f(n-1)} \quad (4-61)$$

和

$$\alpha_2^{(1)} = z \left[\frac{n+1}{f(n)-f(n+1)} + \frac{n}{f(n)-f(n-1)} \right]^2 + z \frac{2(n+1)n \left[J_0 \left(\frac{A}{\hbar\omega} \right) - 1 \right]}{[f(n)-f(n+1)][f(n)-f(n-1)]} \quad (4-62)$$

注意到该计算过程中实际上已经打破了以往的分解法则 (factorization rule), 对于式 (4-60) 中的微扰系数 $\alpha_{2p}^{(n)}$, 我们运用 Pelster 的一篇文章^[66] 中介绍的图形表示方法来计算。在该方法中, 将某个粒子的产生 (湮灭) 算符用一个对该点进去 (出来) 的箭头表示, 这样所有的系数 $\alpha_{2p}^{(n)}$ 都可以表示为由 n 条内线和两条外线组成的箭头图。在箭头图中, 每个点代表系统的一个格点, n 条内线代表格点内部粒子之间的跃迁, 两条外线分别代表附加的产生和湮灭算符。为了更加清晰的说明问题, 我们以最简单的系数 $\alpha_2^{(1)}$ 为例, 它的图形表示为

$$\alpha_2^{(1)} = \begin{array}{c} \longrightarrow \bullet \longrightarrow \bullet \longrightarrow \end{array} \quad (4-63)$$

在计算普通的玻色-哈伯德哈密顿量时, 一个单粒子可约图可以约化成不可约图的乘积, 就像普通的费曼图一样^[115, 116]

$$\alpha_2^{(1)} = \begin{array}{c} \longrightarrow \bullet \longrightarrow \end{array} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \begin{array}{c} \longrightarrow \bullet \longrightarrow \end{array} \quad (4-64)$$

在上式中 $\begin{array}{c} \longrightarrow \bullet \longrightarrow \end{array}$ 和 $\sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij}$ 是相互独立的, 所以它可以被重新写为

$$\alpha_2^{(1)} = zt \left(\begin{array}{c} \longrightarrow \bullet \longrightarrow \end{array} \right)^2 \quad (4-65)$$

而在有效哈密顿量中,

$$\alpha_2^{(1)} = \begin{array}{c} \longrightarrow \bullet \longrightarrow \end{array} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} J_0 \left(\frac{A}{\hbar\omega} (\hat{n}_i - \hat{n}_j) \right) \begin{array}{c} \longrightarrow \bullet \longrightarrow \end{array} \quad (4-66)$$

式中 $\sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} J_0 \left(\frac{A}{\hbar\omega} (\hat{n}_i - \hat{n}_j) \right)$ 取决于相邻格点的粒子数之差, 所以它与 $\begin{array}{c} \longrightarrow \bullet \longrightarrow \end{array}$ 是相关的, 因此, 因式分解法则在这里失效。这会导致单粒子可约图也会对系统的有效势有贡献。

$$\frac{1}{c_2(t)} = \frac{1}{\alpha_2^{(0)}} \left(1 + \frac{\alpha_2^{(1)}}{\alpha_2^{(0)}} t \right) \quad (4-67)$$

而根据朗道理论, 相边界可以通过令有效势的二阶系数为零来求得, 因此

$$1 + zt \left[\frac{n}{f(n)-f(n-1)} + \frac{n+1}{f(n)-f(n+1)} \right] + \frac{n(n+1)2zt \left[J_0 \left(\frac{A}{\hbar\omega} \right) - 1 \right]}{[f(n)-f(n-1)][f(n)-f(n+1)]} = 0 \quad (4-68)$$

注意到当系统的振幅 A 消失的时候, 因为 $J_0(0) = 1$, 相边界条件 (4-68) 退化到

普通的平均场相边界条件。为了证明朗道有效势理论的有效性，我们也计算了Gutzwiller平均场的结果，并将两者的结果进行了比较

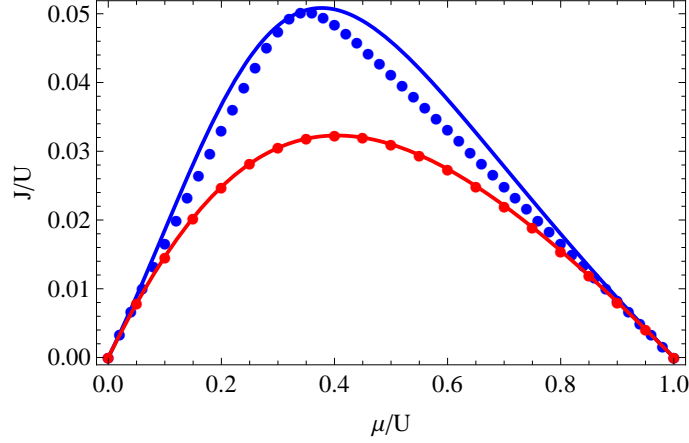


图 4-3 一阶朗道有效势理论和GMF平均场的相图比较。图中点代表GMF的结果；而实线表示朗道有效势理论的结果，红色和蓝色分别代表 $A/(\hbar\omega)$ 为1和2.2

Fig.4-3 Comparing of the first order EPLT result and GMF phase diagram, The dots represent the result of GMF while the solid lines represent the result of EPLT, different color represents different driven amplitude $A/(\hbar\omega)$, the red is 1 while the blue stands for 2.2

按照一般的Gutzwiller平均场的方法，假设系统的基态波函数是局域的单格点的波函数的直积^[107-112]：

$$|\psi\rangle = \prod_i \sum_{n_i=0}^{\infty} g_{n_i} |n_i\rangle_i \quad (4-69)$$

如果做个截断，只考虑三个态 $|n_i - 1\rangle_i$ 、 $|n_i\rangle_i$ 和 $|n_i + 1\rangle_i$ 的话，系统的单点基态能量可以写为：

$$E/N_s = -zt \left[(n+1)g_n^2 g_{n+1}^2 + 2J_0 \left(\frac{A}{\hbar\omega} \right) \sqrt{n(n+1)} \times g_n^2 g_{n+1} g_{n+1} + n g_{n-1}^2 g_n^2 \right] + f(n-1)g_{n-1}^2 + f(n)g_n^2 + f(n+1)g_{n+1}^2 \quad (4-70)$$

而参数 g_{n-1} 、 g_n 、 g_{n+1} 则由拉格朗日极值条件来确定，即在归一化条件

$$g_{n-1}^2 + g_n^2 + g_{n+1}^2 = 1 \quad (4-71)$$

下确定系统的能量(4-70)的最小值。在边界条件附近，我们可以假设 $g_{n-1} = \delta g_{n-1}$ ， $g_n = 1 + \delta g_n$ ， $g_{n+1} = \delta g_{n+1}$ ，式中 δg_{n-1} 、 δg_n 、 δg_{n+1} 是一个小量。由此得到了相边界

$$1 + zt \left[\frac{n}{f(n) - f(n-1)} + \frac{n+1}{f(n) - f(n+1)} \right] + \frac{n(n+1)z^2 t^2 \left[1 - J_0^2 \left(\frac{A}{\hbar\omega} \right) \right]}{[f(n) - f(n-1)][f(n) - f(n+1)]} = 0 \quad (4-72)$$

跟式(4-68)一样，在振幅消失的时候，它的相边界条件退化到普通的平均场相

边界条件。

但是，当逐渐增大振幅 A 之后，它们给出的相边界条件不同。在图 4-3 中我们比较了不同参数的时候 GMF 和量子蒙特卡罗方法的相图，在 $A/(\hbar\omega)$ 比较小的时候，两者的结果基本没有区别，而当 S 波周期性调制振幅比较大时，两者给出了不同性质的相图，GMF 给出了一个三角形的相图，而 EPLT 虽然给出的仍然是一个环形的相图，但是却在某些地方是凹函数，而不是凸函数。这是第一次在某种系统中发现一阶的朗道有效势理论和平均场的结果出现了差异，而且由于两者在振幅较大的时候给出的相边界已经出现了质的不同，至少有一种方法在振幅较大的时候会失效。而朗道有效势理论给出的相边界出现了凹函数，与普通的玻色哈伯德模型中的相图已经出现了根本不同，到底这是低阶结果的截断效应，还是随着振幅的增大系统发生了根本的不同，抑或是理论在振幅增大的时候会失效，在这里暂时不做讨论。我们暂且把系统的 S 波调制的振幅限制为 $0 < A/(\hbar\omega) < x_2$ 即 $x_2 \approx 1.52$ 时，这时，一阶朗道有效势的理论和平均场理论所给出的结果是完全一致的，而且得到的相边界也是一个凸函数，与在玻色-哈伯德模型中没有本质的区别。因此在以后的低阶结果的分析计算都将参数局域在 $x_2 \approx 1.52$ 内。

4.4.2 二阶的结果

本节计算系统的朗道有效势理论的二阶结果的相边界条件。在普通的光晶格中，二阶结果通常就已经非常精确了。我们会证明在伴随 S 波周期性调制的系统中这种情况仍然成立。按照上一节中介绍的方法微扰计算到二阶的时候得到的相边界条件为

$$t = \frac{\tilde{\alpha}_1}{2(\tilde{\alpha}_2 - \tilde{\alpha}_1^2)} + \frac{1}{2(\tilde{\alpha}_2 - \tilde{\alpha}_1^2)} \sqrt{\tilde{\alpha}_1^2 - 4(\tilde{\alpha}_2 - \tilde{\alpha}_1^2)} \quad (4-73)$$

这里那些缩写 $\tilde{\alpha}_1 = \alpha_2^{(1)}/\alpha_2^{(0)}$, $\tilde{\alpha}_2 = \alpha_2^{(2)}/\alpha_2^{(0)}$, $\alpha_2^{(2)}$ 的表达式为

$$\alpha_2^{(2)} = z(z-1)\alpha_{21}^{(2)} + z\alpha_{22}^{(2)} \quad (4-74)$$

其中第一项的表达式为

$$\alpha_{21}^{(2)} = \left[\frac{n}{f(n) - f(n-1)} + \frac{n+1}{f(n) - f(n+1)} \right]^3 + \left[J_0\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right) + 3 \right] \left[J_0\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right) - 1 \right] \quad (4-75)$$

$$\times \left\{ \frac{n(n+1)^2}{[f(n) - f(n-1)][f(n) - f(n+1)]^2} + \frac{n^2(n+1)}{[f(n) - f(n-1)]^2[f(n) - f(n+1)]} \right\}$$

而第二项的具体表达式为

$$\begin{aligned}
 \alpha_{22}^{(2)} = & - \frac{2(n-1)n(n+1)J_0\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)J_0\left(\frac{2A}{\hbar\omega}\right)}{[f(n-1)-f(n)][f(n-2)+f(n+1)-2f(n)][f(n-1)+f(n+1)-2f(n)]} \\
 & + \frac{2n(n+1)(n+2)J_0\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)J_0\left(\frac{2A}{\hbar\omega}\right)}{[f(n)-f(n+1)][f(n+2)+f(n-1)-2f(n)][f(n-1)+f(n+1)-2f(n)]} \\
 & - \frac{n(n+1)(n+2)J_0^2\left(\frac{2A}{\hbar\omega}\right)}{[f(n)-f(n+1)]^2[f(n-1)+f(n+2)-2f(n)]} \\
 & - \frac{(n-1)n(n+1)J_0^2\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)}{[f(n+1)+f(n-2)-2f(n)][f(n-1)+f(n+1)-2f(n)]^2} \\
 & - \frac{n(n+1)(n+2)J_0^2\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)}{[f(n+1)+f(n-1)-2f(n)]^2[f(n-1)+f(n+2)-2f(n)]} \\
 & - \frac{(n-1)n(n+1)J_0^2\left(\frac{2A}{\hbar\omega}\right)}{[f(n)-f(n-1)]^2[f(n+1)+f(n-2)-2f(n)]} \\
 & + \frac{(n-1)n(n+1)J_0^2\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)}{[f(n-1)-f(n)][f(n-1)+f(n+1)-2f(n)]^2} \\
 & - \frac{n(n+1)(n+2)J_0^2\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)}{[f(n)-f(n+1)][f(n-1)+f(n+1)-2f(n)]^2} \\
 & + \frac{2n^2(n+1)\left[J_0^2\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)-J_0\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)\right]}{[f(n-1)-f(n)]^2[f(n-1)+f(n+1)-2f(n)]} \\
 & + \frac{2n(n+1)^2\left[J_0^2\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)-J_0\left(\frac{A}{\hbar\omega}\right)\right]}{[f(n)-f(n+1)]^2[f(n-1)+f(n+1)-2f(n)]} \\
 & + \frac{n^3}{[f(n)-f(n-1)]^3} + \frac{(n+1)^3}{[f(n)-f(n+1)]^3} \tag{4-76}
 \end{aligned}$$

为了检查二阶朗道有效势结果的精确性，我们用两种其他的方法来计算系统的相图，一种是强耦合方法^[30]，另一种是量子蒙特卡罗数值模拟算法，我们仅计算二维系统的填充数 $n = 1$ 时的相图。

首先来介绍强耦合展开方法。强耦合展开方法是基于瑞利-薛定谔微扰论的一套方法，它可以用来确定从不可压缩相到可压缩相的由粒子或空穴激发引起的二阶相变的相边界。首先，可以计算得到系统的不可压缩相或粒子（空穴）激发态的能量，然后运用简并微扰论和非简并微扰论得到系统的高阶微扰能量。由这些能量值，就可以得到系统的相边界。

我们以玻色-哈伯德模型为例来说明怎样用强耦合展开方法来计算系统的相边界，从莫特绝缘态到超流态的二阶相变玻色-哈伯德哈密顿量的非微扰部分是 $H_0 = \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i$ ，而微扰部分是 $H' = -t \sum_{i,j} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i)$ 。当 t 为零

的时候，莫特绝缘态的基态可以被精确的解出来，为 $\psi_0 = \prod_i (\hat{b}_i^\dagger)^n |0\rangle / \sqrt{n!}$ 。同时，粒子激发态却是简并的，因为无论把粒子放到哪个点上，能量都是相同的。

莫特绝缘态的零阶能量为 $E^{(0)} = [Un(n-1)/2 - \mu n]N$ ，这里 N 是指总的格点数，一阶的能量为零，二阶的能量的微扰表达式为 $E^{(2)} = \sum_{i \neq 0} \langle g | H' | e_i \rangle \langle e_i | H' | g \rangle / (E_0 - E_i)$ ，这里 $|g\rangle$ 是系统的基态波函数，能量为 E_0 ； $|e_i\rangle$ 是激发态的波函数，能量为 E_i 。莫特绝缘态的二阶微扰能量可以看成是一个点跃迁到相邻的点然后又跃迁回来，这样可以得到二阶的微扰能量为 $-z(n+1)Nt^2/U$ ，其中 z 是系统的配位数。这样到二阶截断系统的总能量为 $E_M = E^{(0)} - z(n+1)Nt^2/U$ 。

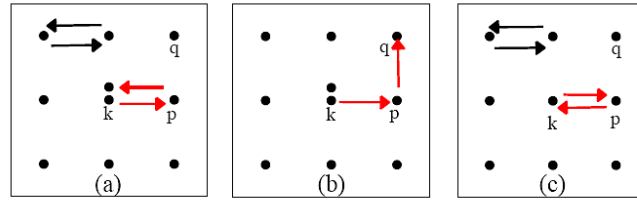


图 4-4 强耦合展开二阶微扰的示意图

Fig.4-4 Second order perturbation diagram for strong coupling expansion

对于粒子激发态，基态的能量为 $E^{(0)} = -\mu + nU$ ，而基态的波函数为 $\psi_e = \sum_j a_j \hat{b}_j^\dagger \psi_0$ ，归一化关系为 $\sum_j |a_j|^2 = 1$ 。一阶微扰能量为 $E^{(1)} = \langle g | H' | g \rangle$ 。为了使一阶的能量 $E^{(1)}$ 最小，我们需要将矩阵 $M_{i,j} = \psi_0 \hat{b}_i H' \hat{b}_j^\dagger \psi_0$ 对角化并取其最小的本征能量作为一阶能量。用通常的话来讲，就是一阶的微扰破简并。根据基态的平移对称性，我们得到一阶能量的基态能量为 $-z(n+1)t$ ，非简并的基态为 $\psi_e = \sum_j \hat{b}_j^\dagger \psi_0 / \sqrt{Nn}$ 。在图 4-4(a)和(b)中我们可以看到粒子激发态的两种不同的二阶微扰图（红色的图）。第一种图是闭图 $|n_k n_p\rangle$ ，格点 k 和 p 的粒子数变化过程为 $|21\rangle \rightarrow |30\rangle \rightarrow |21\rangle$ ，和它相关的能量为 $-(n+2)t^2/(2U)$ 。第二种是开图 $|n_k n_p n_q\rangle$ ，相关的 k 、 p 和 q 三个格点的粒子数变化为 $|211\rangle \rightarrow |202\rangle \rightarrow |112\rangle$ ，而相关的能量为 $-(n+1)t^2/U$ 。开图的贡献不为零是因为基态的简并，它的数量为 $z(z-1)$ 。而闭图的数量为 z ，另外还有 $z(N-2)$ 数量的闭图与加了一个粒子的点无关（黑色的图）。这样得到的二阶的能量为 $E_p^{(2)} = -[z(N-2)(n+1) + z(n+2)/2 + z(z-1)(n+1)]t^2/U$ 。而系统截断到二阶的总能量为 $E_p = E^{(0)} - \mu + nU - z(n+1)t + E_p^{(2)}$ 。让系统的绝缘态的能量和粒子激发态的能量相等 $E_M = E_p$ ，我们就可以得到系统的相边界的上边界 $\mu_c = nU - z(n+1)t - [z(n+2)/2 + z(z-1)(n+1) - 2z(n+1)]t^2/U$ 。下边界同样可以通过计算系统的空穴激发态得到。

通过上面的二阶的计算过程我们已经发现跟加了粒子的格点无关的图在莫

特态和在粒子激发态中的贡献是一样的，因此在计算相边界的时候可以被减掉，所以不必要去计算它们。最后总结一下强耦合展开方法的实现步骤：(i)找出所有的与加了一个粒子的格点 k 相关的图，计算出它们的能量，然后把它们的能量相加。(ii)计算上述找出的所有图对基态能量的贡献，我们称之为能量修正。(iii)在(i)中所计算的能量和(ii)中的能量修正相等的时候，我们得到了系统的上边界。系统的下边界也很容易得到，只需要将粒子激发改为空穴激发即可，其他步骤完全相同。

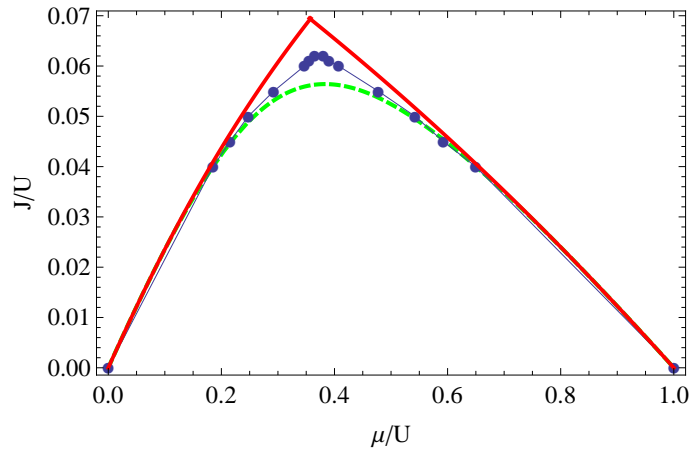


图 4-5 调制振幅 $x = 0.4$ 时的二维正方晶格的相图。绿色的虚线，红色的实线和蓝色的点分别表示二阶的朗道有效势理论，三阶的强耦合展开和量子蒙特卡罗的相图

Fig.4-5 Phase boundary of a 2D square lattice for $x = 0.4$: third-order strong-coupling expansion result (red solid line), QMC result in the thermodynamic limit (blue line dot), and second-order EPLT result (35) (green dashed line)

把上边介绍的方法运用到伴随S波周期性调制的光晶格中的玻色子系统中，得到系统计算到三阶的强耦合展开方法上边界为

$$\begin{aligned} \mu_1 = 1 - 2zt - t^2 \left\{ 2z^2 J_0^2(x) + z \left[\frac{3}{2} J_0^2(2x) - 6J_0^2(x) \right] \right\} \\ - t^3 \left\{ 6z^3 J_0^3(x) + z^2 \left[6J_0(2x)J_0^2(x) - 24J_0^2(x) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{3}{2} J_0^2(2x) \right] + z \left[18 - 6J_0(2x) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4-77)$$

下边界为

$$\mu_2 = tz + t^2 J_0^2(x)(2z^2 - 6z) + t^3 J_0^2(x)(6z^3 - 18z^2 + 12z) \quad (4-78)$$

在上面的式中引入了参数 $x = A/(\hbar\omega)$ 。我们发现强耦合方法的二阶结果其实可以由朗道有效势展开方法的二阶结果(4-73)通过对 $\mu = \mu(t)$ 对 t 进行泰勒展开得到。这是一个很有趣的发现，因为考虑到两种方法是如此的不同，朗道有效势

理论擅长于高维系统而强耦合方法在低维系统表现更好。

另一方面我们运用了更高精度的量子蒙特卡罗数值模拟方法，该算法基于镰刀展开方法(stochastic series expansion)^[37-39, 113, 114]，系统的参数为 $J_0(A/(\hbar\omega)) = 0.4$ 。为了得到更加精确的解，设定温度为 $T = U/(20N)$ 的时候计算的尺寸为 $N = 8 \times 8$ 、 10×10 和 12×12 ，然后用有限尺寸分析法得到无限大尺寸时候的值。从图 4-5可以看出，量子蒙特卡罗的相图（蓝色点线）仍然在强耦合（红色线）和EPLT的相图（绿色虚线）之间，和普通的玻色-哈伯德模型类似。其次可以看出，我们的二阶朗道有效势理论结果与量子蒙特卡罗数值模拟的结果的误差不超过6%，说明该方法用来进行定量的分析是足够的。虽然三维的时候，由于系统太过复杂，以至于无法得到一个可信的量子蒙特卡罗模拟结果，但是由于一般情况下EPLT方法在三维的时候更加的精确，因此我们认为，在三维的时候得到的结果更加的可信。不能用量子蒙特卡罗分析全参数情况下的相图变化的原因是，当 $A/\hbar\omega$ 过大时，QMC 算法会出现符号问题，从而导致结果的不可信。

下面我们用二阶朗道有效势理论的结果来分析系统相图的临界值。图 4-6是系统相图的临界点的相对跃迁振幅 $\Delta t_c = t_c(A)/t_c(A = 0)$ 和相对化学势 $\Delta\mu_c = [\mu_c(A) - (n - 1)U] / [\mu_c(A = 0) - (n - 1)U]$ 对于系统的S-波调制振幅的函数，其中2(3)维使用点线图（点图）表示，其中蓝色圆点线图（点图），褐色的方点线图（点图），绿色的菱形点线图（点图），红色的三角点线图（点图）分别表示 $n = 1$ 、 $n = 2$ 、 $n = 3$ 和 $n = 100$ 。首先从图中读出的是随着系统的S-波振幅的增大，系统的莫特绝缘态的区域会扩大，所以与对光晶格的周期性调制类似，对S-波的周期性调制也可以作为使系统从超流态到莫特绝缘态的一种驱动。并且我们可以看到3维系统比2维系统对于相同的振幅A莫特绝缘态的区域扩展的更大，也就是说，振动效果对于配位数 z 比较敏感。这一点可以通过系统的有效哈密顿量(4-53)来理解。它的跃迁项含有跃迁点粒子数之差的贝塞尔函数，一般来说高阶跃迁过程的振动效果更加的明显，因为它们更加可能有更大的粒子数之差，而更高维度的系统具有更多的高阶跃迁过程。从图 4-6a中我们也可以看出不管对于二维还是三维系统，我们可以看出对于固定的振幅A，所有的粒子填充数 n 的莫特绝缘态扩大的倍数都是相同的。这一点也可以从系统的有效哈密顿量中可以看出来(4-53)，毕竟跃迁项是取决于相邻格点之间的粒子数差，而与粒子填充数的关系不大。

当然，从图 4-6b中也可以看出系统临界点的化学势的一些变化趋势，首先可以看出在三维的时候，系统临界点的化学势是单调递减的，但是在二维的时

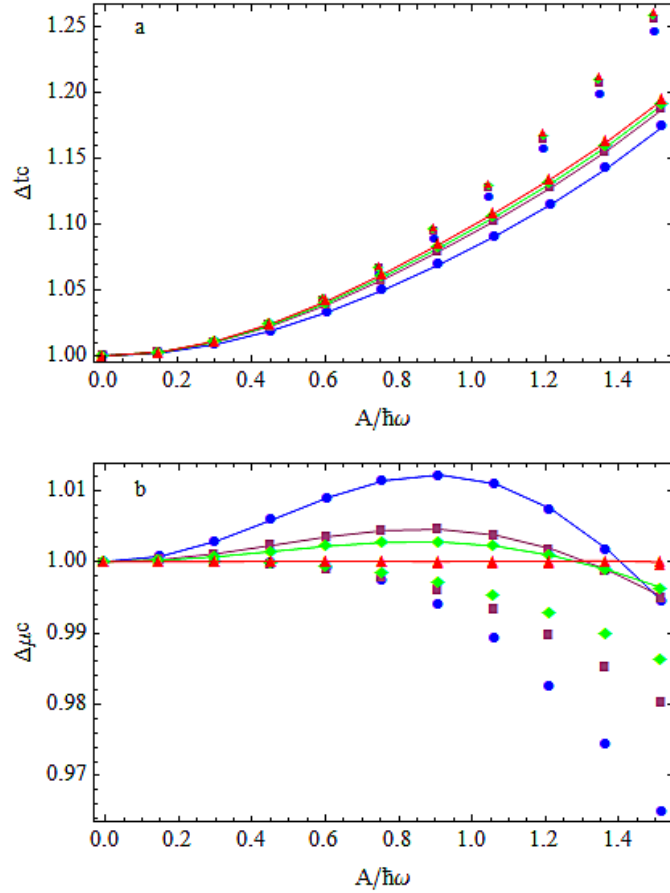


图 4-6 系统相图的临界点的跃迁振幅和化学势随调制振幅的变化：其中点图代表立方晶格的结果，而点线图代表正方晶格的结果

Fig.4-6 Change of the hopping amplitude and chemical potential of the critical point with the driven amplitude: the dots represents the result of cubic lattice while the line-dot represents the result of square lattice

候，它是先增加后递减。也可以从图中看出，对于所有的参数 n 和 A ，系统的临界点的化学势的变化都很小。直到 $A/(\hbar\omega) = 1$ ，系统的临界点的化学势的变化范围小于一个百分点。

由于系统的不同的填充数 n 的临界点的跃迁项对于相同的S-波振幅的重整化是一致的，而临界点的化学势又是基本不变的，因此我们猜想系统的哈密顿量是否可以映射到一个类似于玻色-哈伯德模型的哈密顿量

$$\hat{H} = -t\lambda(x) \sum_{\langle ij \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_i \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_i \mu \hat{n}_i \quad (4-79)$$

这里 $\lambda(x)$ 是一个对跃迁项 t 的重整化函数， $x = A/(\hbar\omega)$ 。可以通过Taylor展开得到

$$\lambda(x) = 1 + ax + bx^2 + cx^3 + dx^4 + \dots \quad (4-80)$$

从图 4-6a可以得到：三维系统参数 $a = -0.0045$ 、 $b = 0.1356$ 、 $c = 0.0366$ 、 $d = 0.0129$ 和二维系统参数 $a = -0.0018$ 、 $b = 0.1212$ 、 $c = 0.0561$ 、 $d = 0.0178$ 。从

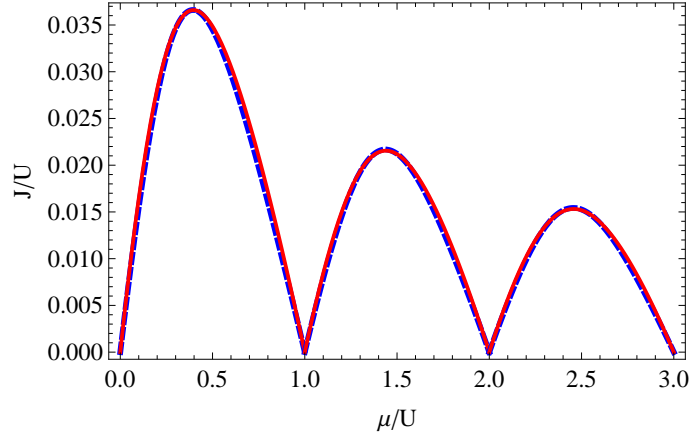


图 4-7 调制振幅 $A/(\hbar\omega) = 1$ 时新旧有效模型的相图对比，红色的实线和蓝色的虚线分别表示新旧有效模型的结果

Fig.4-7 Comparison of phase diagram of new and old effective model: the red solid line and blue dash line represent the new and old effective model respectively

图 4-7可以看出，新的有效模型和旧的有效模型在三维 $A/(\hbar\omega) = 1$ 的时候得到了基本重合的相图。进一步的分析表明，无论是在二维或三维的时候，新旧有效模型之间得到的相图基本都是重合的，因此可以说，新的有效模型不仅可以很好的描述系统的临界点，还可以描述整个相图。

为了进一步的检验新的等效哈密顿量是否适用于相边界附近的临界区域，我们也用了数值的QMC算法来计算两种模型的超流密度。图 4-8中QMC模拟的是参数为 $t/U = 0.05$ 、 $A/(\hbar\omega) = 0.4$ 、 $N = 8 \times 8$ 、 $T = U/(20N)$ 的二维系统。从图中可以看出，在相边界附件，新旧模型的超流密度基本相同，而在偏离相边界很远的地方，它们的超流密度开始不同，因此如果仅仅是对系统的相边界及其附近的区域感兴趣，那么新的等效模型可以很好的描述该系统。

我们为系统找到的新的和玻色-哈伯德模型类似的哈密顿量实际上是在系统的调制幅度不大的情况下，可以把一个与系统相邻格点粒子数之差有关的跃迁项等效到一个与其无关的跃迁项，这时，系统的临界行为和普通的玻色-哈伯德模型相同，相图的形状也类似。但是，当再进一步增大系统的调制幅度的时候，低阶结果已经显示出了这种不同，究竟是因为这仅仅是低阶的截断造成，或者是朗道有效势理论方法已经不适用，又或者是系统真的出现了新的性质，目前还不得而知，目前最好的数值方法量子蒙特卡罗和密度矩阵重整化群对于我们理解这个问题帮助不大：在振幅较大的时候，量子蒙特卡罗会遇到

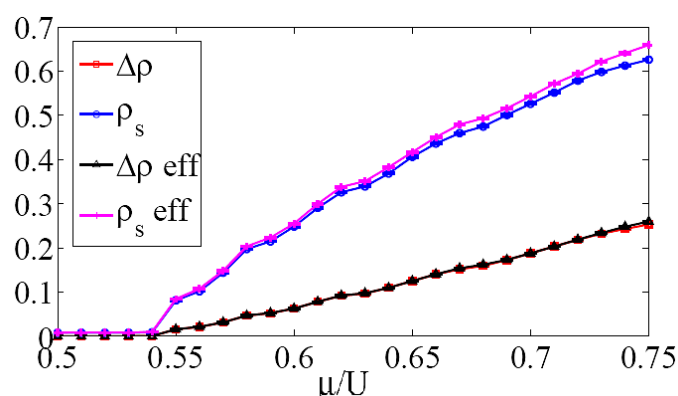


图 4-8 新旧有效模型的超流密度对比

Fig.4-8 Superfluid density of new and old effective model

负符号问题，甚至在 $A/\hbar\omega$ 大于0.4的时候负符号问题就不能被忽略；而密度矩阵重整化群所遇到的问题是跃迁项中存在一个算符的贝塞尔函数。在密度矩阵重整化群算法中，算符是被看做矩阵的，而矩阵的贝塞尔函数是很难处理的，这导致了密度矩阵重整化群方法很难计算到大的系统，也就是不可能给出一个很可信的结果，另外我们更为关注二维系统的相图，因为这方便和我们的朗道有效势理论进行比较，而密度矩阵重整化群更多的是应用在一维的系统中。而现存的解析的方法也不能为我们提供更多的信息，因为在调制振幅增大的时候，高阶结果的重要性也会增大，因为高阶结果涉及到的粒子数的波动的可能性更大，因此调制的作用更加的明显。而大多数的解析方法都是微扰论，只能计算到低阶。因此在调制振幅增大时，迫切需要一种新的理论工具来回答我们之前提出的问题。

在下一节中，我们运用最近新出的算法——过程链算法^[75, 76]来处理这个问题。过程链算法是一种将格点系统中的物理量的微扰计算到高阶的算法，因此，它也可以把朗道有效势理论计算到高阶，这样就可以排除低阶截断的影响。下一节中我们将会来介绍怎样用这种结果将系统的有效势计算到高阶以及得到的高阶结果。

4.5 用过程链算法计算伴随S波周期性调制的光晶格中玻色子系统的相图

这一节采用一种新的算法——过程链算法来计算伴随S-波周期性振动的光晶格中玻色子系统的相图。我们会首先来介绍这种过程链的算法，然后通过对比普通的玻色-哈伯德模型的相图的计算来检验程序的正确性，最后我们把它运

用到伴随S-波周期性振动的光晶格中的玻色子系统中，并对得到的高阶结果进行讨论。

4.5.1 过程链算法简介

当使用瑞利-薛定谔微扰方法的时候，我们是使用递推的方式得到各阶的结果。但是，这种算法有两个缺点，一是高阶的公式需要低阶的来推导得到，二是它很难数值化。为了解决上述困难，A. Eckardt使用Kato表示来表示各阶的微扰表达式，这些Kato项可以很容易用电脑来生成，而且只需生成一次，因为对于任何的微扰计算来说，微扰公式都是相同的。在生成这些Kato表示后，人们发现某个物理量的微扰可以表示为从一个基态经过一系列跃迁过程然后回到这些基态的过程链来表示，而这些过程链包含在某些图形中。比如要计算二阶的强耦合展开结果，就可以用图 4-4中的箭头图来表示它，所以该算法的第二步是找到相应阶的所有的箭头图。第三步就是找出包含在这些箭头图中的过程链，然后对于每一条过程链，找出它匹配的Kato表示进行计算，再把所有的结果相加，就得到系统的相应阶的物理量的微扰结果。在后面，我们分三个部分详细的讲述算法的细节，并且会用低阶的玻色-哈伯德模型的微扰计算举例来说明。

首先我们来介绍Kato表示。Kato表示是微扰论的另一种表达方式，与瑞利-薛定谔表示方式不同的是， n 阶的微扰表达式是用一个迹来表示

$$E_M^{(n)} = Tr \sum_{\{\alpha_l\}} S^{\alpha_1} H' S^{\alpha_2} H' \dots H' S^{\alpha_{n+1}} \quad (4-81)$$

限制条件为

$$\sum_1^{n+1} \alpha_l = n - 1, \alpha_l \geq 0 \quad (4-82)$$

这其中

$$S^{\alpha_l} = \begin{cases} -|g\rangle\langle g| & \text{if } \alpha_l = 0 \\ \frac{|e\rangle\langle e|}{(E_g^0 - E_e^0)^{\alpha_l}} & \text{if } \alpha_l \neq 0 \end{cases} \quad (4-83)$$

对于公式 (4-82) 中的每一项，我们称之为Kato迹链，并将其简记为 $\langle \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{n+1} \rangle$ 。由公式 (4-83)，可以得到

$$S^{\alpha_i} S^{\alpha_j} = \begin{cases} -S^0 & \alpha_i = \alpha_j = 0 \\ 0 & \alpha_i = 0, \alpha_j \neq 0 \text{ or } \alpha_i \neq 0, \alpha_j = 0 \\ S^{\alpha_i + \alpha_j} & \alpha_i \neq 0, \alpha_j \neq 0 \end{cases} \quad (4-84)$$

从公式 (4-82) 中也可以看出, α_l 中至少有两个元素为零, 考虑到迹中算符的圆柱对称性, 公式 (4-81) 中的迹可以被写为一个链, n 阶的可以表示为

$$\langle g | H' S^{\alpha'_1} H' \dots S^{\alpha'_{n-1}} H' | g \rangle \quad (4-85)$$

我们称之为 *Kato* 链, 并且简记为

$$(\alpha'_1 \alpha'_2 \dots \alpha'_{n-1}) \quad (4-86)$$

如果用 $-|g\rangle\langle g|$ 来代替 *kato* 链中的 S^0 , 并且使用简写 $|g\rangle \rightarrow$ 和 $\langle g| \rightarrow$, 那么 *Kato* 链就会破碎成基本矩阵元 (EME) — (\dots) , 在括号中不会再有零存在。EME 具有反射对称性, 这意味着 $(\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3) = (\alpha_3 \alpha_2 \alpha_1)$ 。为了方便起见, 我们将所有的 EME 用它最小的一种等价方式来表示, 比如使用 (121321), 而不是 (123121)。在这个基础上, 再定义两个规则排列 EME 的序: 首先我们比较 EME 中的 S^α 的个数, 比如 (111) > (12); 当数目相同时, 比较第一个不相同的 S^α , 比如 (123) < (132)。这样就可以将 *Kato* 链中的 EME 来排序。举例来说, $\langle 2021011001 \rangle$ 可以被写成 *Kato* 链 $-(11003021)$, 然后它可以被写成 EME 列——(11)() (3)(21), 然后我们对 EME 列排序 () (3) (11) (12), 最后被写成最终的形式——(03011012)。我们将其储存起来。在 EME 列中, () 表示 $\langle H' \rangle$ 表示一阶的微扰能量, 在非简并的时候, 它为零, 但是对于简并基态, 比如强耦合的情况, 它的贡献非零。

下面我们以四阶的微扰论为例来说明我们怎样简化 *Kato* 链, 这个过程也能证明 *Kato* 表示与瑞利-薛定谔表示是等价的。在 *Kato* 链中, 每一个跃迁过程 $\langle e_1 | H' | e_2 \rangle$ 可以用一个箭头表示。在格点系统中, 每一个微扰项可以看成是一个箭头图。根据连接丛定理 (linked cluster theory), 只有连通图才会对微扰项有贡献, 因此可以忽略所有的非连通图。所以我们需要得到所有的不等价的箭头图以及它们的权重。无论是开图还是闭图, 其中的每一个箭头都可以看成是粒子 (空穴) 从一个格点跃迁到另一个格点, 所以每一个箭头图都可以通过粒子走过的路径来生成。要得到所有的图, 首先需要固定起始点, 并用不同的数字来表示不同的方向, 比如用 '*u*' 来表示向上, '*d*' 表示向下, '*l*' 表示向左, 而 '*r*' 表示向右。这样, 我们就可以通过枚举法得到所有的箭头图, 并用一个字母 (数字) 链来表示它。

表 4-1 4阶微扰流程图

Table4-1 Fourth order perturbation Katolist

Algorithm	Output
1. Generating all Kato trace list	$\langle 30000 \rangle, \langle 21000 \rangle, \langle 20100 \rangle, \dots, \langle 10101 \rangle, \dots, \langle 00003 \rangle$
2. Neglect all the terms which has zero in one end and nonzero in other end because of Eqn.4-84	$\langle 03000 \rangle, \langle 02100 \rangle, \langle 02010 \rangle, \langle 00210 \rangle, \langle 01110 \rangle, \langle 00120 \rangle, \langle 01020 \rangle, \langle 01200 \rangle, \langle 00030 \rangle, \langle 10011 \rangle, \langle 10101 \rangle, \langle 11001 \rangle, \langle 20001 \rangle, \langle 10002 \rangle, \langle 00300 \rangle$
3. Change the Kato trace list to Katolist	$(300), (210), (201), (021), (111), (012), (102), (120), (003), -(012), -(102), -(210), -(300), -(300), (030)$
4. Insert the abbreviation $ g\rangle \rightarrow$ and $\langle g \rightarrow$, order the EMEs array	$00(3), -0(12), -(1)(2), -0(12), (111), -0(12), -(1)(2), -0(12), 00(3), 0(12), (1)(2), 0(12), -00(3), -00(3), 00(3)$
5. Collect the same arrays and get their weight	$-(1)(2), -20(12), 00(3), (111)$
6. Order and change them back to Katolist	$(003), 2(012), (102), (111)$

以2阶的图为例来说明，一共可以得到16幅图，但是只有 $(ud), (du), (lr)$ 和 (rl) 表示闭图。对于有不止一种表示方式的图，如4-9(a)，可以用 $(lrll)$ 或 $(rllr)$ 来表示，这是如果定义 $r > l > u > d$ ，而只选该图的最大表示方式，则我们只能选择 $(rllr)$ 。

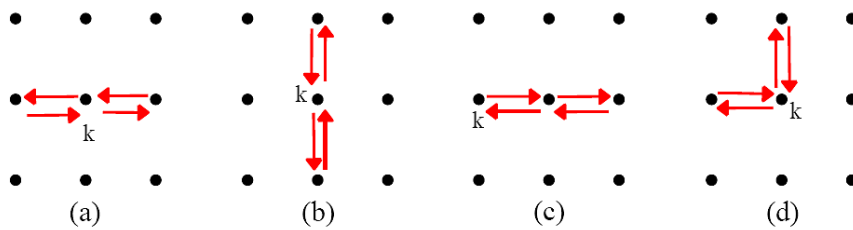


图 4-9 四阶微扰的等价图

Fig.4-9 One 4th order topological equivalent arrow diagrams of the square lattice.

在得到所有需要的图之后，我们需要考虑系统的对称性来缩减图的数量，从而减少计算量。对于考虑对称性之后，等价的图只保留一幅，而等价图的数量被当做该图的权重保留。对于格点系统来说，我们一般要考虑系统的点群对称性和平移对称性。举正方格点系统来说，它的点群对称性 D_4 具有8个操作，图4-9中(b)图可以通过(a)图进行旋转变换得到。将这8种操作作用到图4-9上，我们发现(a)，(b)是等价的，因此权重为2。除此之外，还需要考

考虑系统的平移对称性，比如图 4-9 的 (c) 图可以通过将 (a) 图向右平移一个格点的长度。因为图 (a) 有三个格点，所以一共有 $8 \times 3 = 24$ 种操作，经过所有的这些操作，我们发现一共有六种等价的图，所以需要将 (a) 的权重改为 6。当然，这种平移对称性只适合于莫特绝缘态的时候，对于计算强耦合展开方法粒子激发态或者是空穴激发态，抑或是朗道有效势理论中的存在粒子数产生和湮灭的系数来说不适用。在表 4-2 中，我们展示经过对称性简化之后的四方晶格的各阶图的数量 n_s ，包括能量修正(闭图)和粒子(空穴)激发态(开图)的情况。

表 4-2 各阶的微扰的闭图和开图数量

Table 4-2 the number of closed diagrams and open diagrams for each order

阶数	简化前闭图数量	简化后闭图数量	简化前开图数量	简化后开图数量
1	0	0	1	1
2	1	1	3	2
3	0	0	10	4
4	4	3	36	10
5	0	0	129	22
6	12	7	477	58
7	0	0	1784	140
8	75	29	6668	390
9	0	0	24909	988
10	510	121	92748	2815
11	0	0	344907	7412
12	4284	698	1278092	21516

事实上，还可以进一步的通过考虑系统的拓扑性质来进一步简化图形的数量，比如图 4-9 中的 (a) 和 (d) 事实上是等价的，我们可以考虑所有的拓扑等价中最大的那个表示。比如在图 4-9 中，只有 (c) 和它的权重需要被存储。从表 4-2 可以看出，拓扑简化会极大的简化图的数量，特别是对于开图的情况。

根据上面的介绍，总结为对于生成所有的最简的图我们分成三步：(1) 用枚举法得到所有的图，但是只保存每幅图的最大表示；(2) 通过考虑各种对称性来简化图的数量；(3) 通过考虑系统的拓扑性质来进一步简化系统的图的数量。

最后一步，我们来计算能量修正以及粒子(空穴)激发态能量。对每一个箭头图，我们有很多种方式去给所有的箭头排序，对于其中排成的每一种的箭头链，我们就称之为过程链 (process-chain)。仍然以四阶的正方晶格的图为例

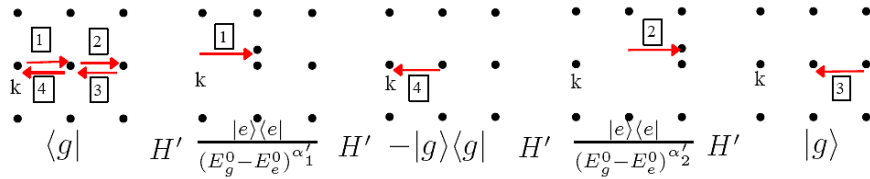


图 4-10 一种能量修正的process-chain和Kato链匹配

Fig.4-10 One process-chain of energy correction Katochain

来说明。在图 4-9 中，只储存箭头图(c)（记为 $rrll$ ）。如果我们给每一个箭头一个标号，四个箭头就会有 $4! = 24$ 种过程链。如图 4-10所示，我们可以得到的一种可能的过程链，将它的标号为1423，所有满足关系 $(\alpha_1' 0 \alpha_2')$ ($\alpha_1' \neq 0, \alpha_2' \neq 0$)都会对上述的过程链有贡献。然后在四阶的所有的最简的Katochain中寻找满足上述类型的，发现只有(102)适合。对于粒子填充数为 m 的系统，上述process-chain对能量的修正的贡献为 $\frac{(-t\sqrt{m}\sqrt{m+1})^4}{(-U)(-1)(-U)^2}$ 乘以Kato链(102)的权重，等得到一幅图的所有过程链的贡献后，需要把它们加起来，然后乘以该幅图的权重，就可以得到这幅图对能量修正的贡献。

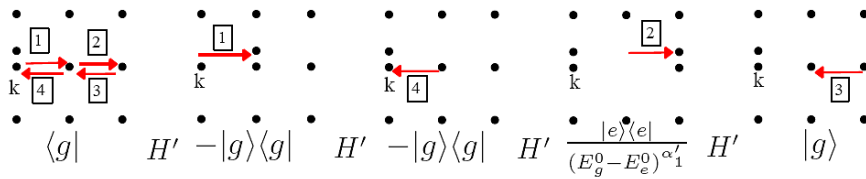


图 4-11 一种粒子激发态的process-chain和Kato链匹配

Fig.4-11 One process-chain of energy correction Katochain

4.5.2 程序的有效性检查

过程链算法作为一种新近出现的算法目前只有很少的几个组在研究，因此无法像量子蒙特卡罗或密度矩阵重整化群一样拥有现成的程序或者大量的对比数据来供我们检查程序的有效性。为了证明程序的有效性，我们首选将这种算法运用到普通的玻色-哈伯德模型中，用它来计算系统的强耦合展开和有效势理论的相边界，并将它们与精确的数值模拟方法所得到的结果来对比。

首先来考虑玻色-哈伯德模型的强耦合展开方法的计算。对于计算粒子（空穴）激发态的能量，我们需要考虑简并的基态，所以相应的算法也需要进行调整。如图4-11所示，所有的 $b_i^\dagger \psi_0$ 态都是基态，因此相同的过程链需要匹配不同的Kato链 $(00\alpha_1')$ ，而符合条件的只有(003)。和计算能量修正一样，我们也需要以下步骤来计算系统的粒子（空穴）激发态的能量：（1）对每一幅图形，生成它

的所有过程链；(2) 对每一个过程链，找出它匹配的所有的Kato链；(3) 对每一个Kato链，计算出它的能量，并且将结果乘以它的权重，得到该Kato链的贡献；(4) 将所有的Kato链的贡献加起来，得到这个过程链的贡献；(5) 将所有的过程链的贡献加起来并且乘以该幅图的权重，得到该幅图的贡献；(6) 再将所有的图的贡献加起来就可以得到系统的粒子（空穴）激发态的能量。当得到了系统的粒子（空穴）激发态的能量和系统的能量修正之后，两者相减我们就能得到系统的上下边界的各阶系数：

$$\text{particle : } \frac{\mu_u}{U} = 1 - \sum_i \beta_u^{(i)} \left(\frac{t}{U}\right)^i \quad (4-87)$$

$$\text{hole : } \frac{\mu_d}{U} = \sum_i \beta_d^{(i)} \left(\frac{t}{U}\right)^i \quad (4-88)$$

由于在一维系统中发生的是BKT相变，也就是在相图的顶点处是非线性的渐进行为，因此我们需要用Pade分析来处理数据以得到和真实的相边界相近的结果。以对空穴激发的结果为例来说明我们的处理过程。具体计算到最高阶为 ν 的下边界的表达式可以写为：

$$\frac{\mu_d}{U} = \sum_{i=0}^{\nu} \beta_d^{(i)} \left(\frac{t}{U}\right)^i \quad (4-89)$$

首先对该式做Borel变换，可以得到

$$B(z) = \sum_{i=0}^{\nu} \beta_d^{(i)} \frac{z^i}{i!} \quad (4-90)$$

然后对上式做Pade变换，也就是把一个泰勒级数展开形式的近似转换成Pade形式，以更好的来模拟尖点处的渐进行为。具体的转换方式为

$$P(x) = \frac{\sum_{i=0}^n a_i x^i}{1 + \sum_{i=1}^m b_i x^i} \quad (4-91)$$

其中 $m + n = \nu$ 。根据所得到的各阶的系数 $\beta_d^{(i)}$ ，就可以计算出上式中 a_i 和 b_i 的值。具体的计算过程为要求函数 $P(x)$ 的 i 阶导数在 $x = 0$ 的时候等于我们所计算的 i 阶的系数 $\beta_d^{(i)}$ 。如果选择 $m = n = 4$ ，就可以得到上下边界的 $P(x)$ 的表达式为

$$P_{up}(x) = \frac{1.26x^4 + 1.88x^3 - 3.21x^2 - 3.11x + 1}{0.09x^4 - 0.15x^3 - 0.14x^2 + 0.89x + 1} \quad (4-92)$$

$$P_{down}(x) = \frac{-1.27x^4 - 0.02x^3 - 1.75x^2 + 2x}{0.04x^4 - 0.1x^3 + 0.12x^2 + 0.13x + 1} \quad (4-93)$$

然后做Borel变换的逆变换，即

$$\frac{\mu}{U}(t) = \int_0^{\infty} P(xt)e^{-x} dx \quad (4-94)$$

就可以得到真实相边界的一种很好的近似。如图4-12所示，经过处理后，强

耦合展开的结果（图中的黑线）和密度矩阵重整化群数（DMRG）值模拟结果（图中的红点）符合的很好。需要说明的是，在后面处理二维系统的时候我们都做了外推，得到的是无穷阶的结果，而在一维的时候，Pade并不是一种外推的方法，它只是将一个函数的泰勒展开近似转化为了一种在非解析的情况下更好的近似，图中显示的仍然是8阶的结果。

表 4-3 一维晶格的上下边界的强耦合各阶系数

Table4-3 the up and low phase boundary coefficients of chain lattice

阶数	粒子激发	空穴激发	能隙
2	1/1	-4/1	5/1
3	6/1	0/1	6/1
4	-113/20	-20/1	287/20
5	14263/150	-64/3	5821/50
6	-1382729/3000	424/3	-602243/1000
7	63434531/22500	-4096/9	8186059/2500
8	-296504213629/16200000	5932/81	-99230204543/5400000

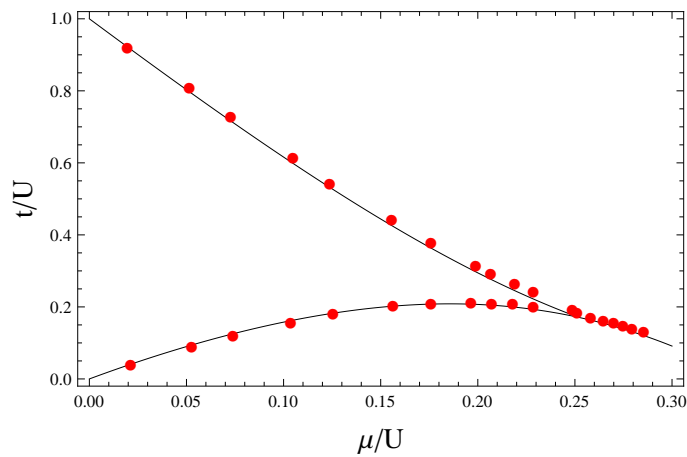


图 4-12 一维晶格的相图：黑色的线表示的是强耦合展开的相图，而红色的点是密度矩阵重整化群的结果

Fig. 4-12 the phase diagram of the chain lattice: the black line represents the strong coupling expansion result while the red dots represents the DMRG result

而正方晶格强耦合展开的各阶系数如表 4-4所示。图 4-13所示的推广到无穷阶的强耦合相边界（黑色的线）和QMC的相边界（红色的点）只是在尖点处有很小的误差。而图 4-14表示各阶的顶点的线性拟合，在无穷阶时，我们得到的结果是0.06002，与量子蒙特卡罗所得到的结果0.05997之间的误差非常小。

表 4-4 正方晶格的强耦合各阶系数

Table 4-4 the up and low phase boundary coefficients of square lattice

阶数	粒子激发	空穴激发	能隙
2	-14/1	8/1	-22/1
3	-120/1	144/1	-264/1
4	-9499/10	616/1	-15659/10
5	-286184/25	14832/1	-656984/25
6	-99329447/750	860416/9	-513092341/2250
7	-5931073654/3375	59722336/27	-4465455218/1125
8	-1257602099088101/56700000	1338421904/81	-2194497431888101/56700000

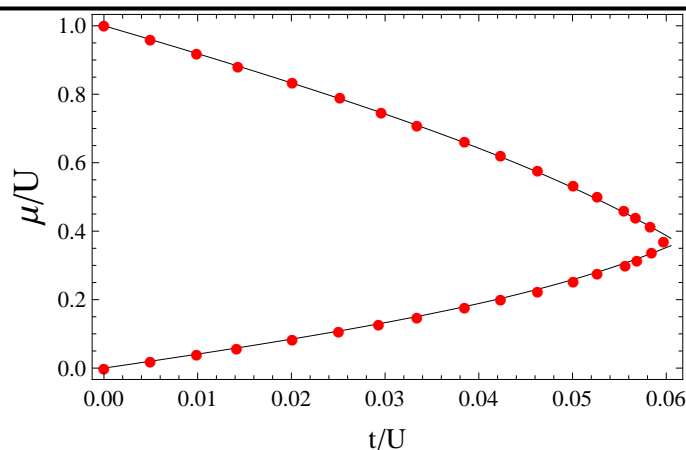


图 4-13 正方晶格的相图，黑色的线表示的是强耦合展开的相图，而红色的点是量子蒙特卡罗的结果

Fig.4-13 the phase diagram of the square lattice: the black line represents the strong coupling expansion result while the red dots represents the QMC result

除了通过过程链算法计算强耦合展开来证明我们程序的正确性之外，我们也将玻色-哈伯德模型的朗道有效势理论计算到高阶。根据第二章中对朗道有效势理论的介绍，如果仅需要知道系统的额相边界的话，那么主要计算自由能对流的二阶展开系数 c_2 ，而如果需要知道系统的更多的临界性质，我们就需要计算系统的自由能对流的所有偶数阶展开系数 c_{2i} 。

下面就是对系数 c_{2i} 用过程链算法进行计算的步骤：第一步如何去寻找微扰的Kato表示，前面说过，它适用于所有的微扰过程，因此我们不需要重新去寻找这些Kato表示。第二步找图形看起来和在强耦合展开完全不同，因为有效势朗道理论的图形多了格点上的产生和湮灭算符，而在强耦合展开算法中，是在粒子数固定的情况下进行的。但是仔细思考的话，我们会发现强耦合展开的图

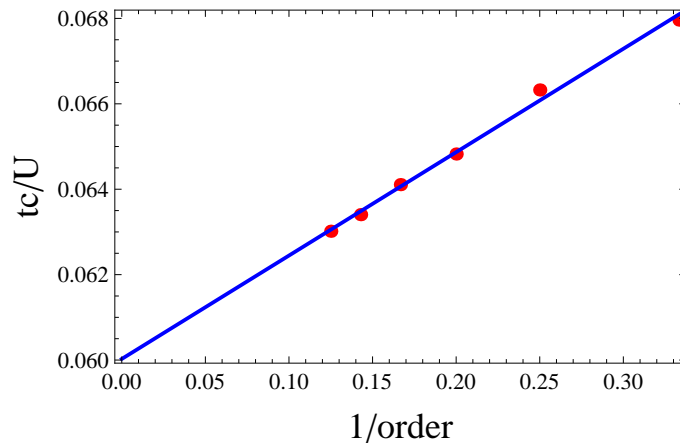


图 4-14 $\mu = 0.6$ 时上下边界的线性和二次项拟合

Fig.4-14 the up and low phase boundary linear fit and quadratic fit when $\mu = 0.6$

形的表示和朗道有效势理论的图形的表示完全相同。在朗道有效势理论的图形表示中，起始点代表粒子的产生点，而结束的点表示粒子湮灭的点，而在强耦合展开中，这表示一个粒子（空穴）从起始点到终点的跃迁过程，但是不管哪种表示都可以用包含起始点到终点的所有开图来表示。图 4-15 给出了几种计算系数 c_{2i} 所需要的图形，在图中，跃迁的过程用箭头来表示，而产生算符用方框来表示，湮灭算符用叉来表示。两者之间的主要不同是在第三步计算的时候，因为在朗道有效势理论中，引入了额外的产生和湮灭算符，因此，在计算 c_{2i} 的时候， n 阶微扰的结果需要 $n + 2i$ 阶的Kato表示，因为系统中现在有两种不同的微扰项。并且由于朗道有效势理论方法是在巨正则系综中进行的，因此必须在不同的化学势下计算，也就是说，为了确定某阶的相边界，我们需要计算多个不同的化学势的值，而不是像之前在强耦合展开中的那样只需要计算上下相边界的系数即可。因此用朗道有效势理论来计算系统的相边界要复杂的多。

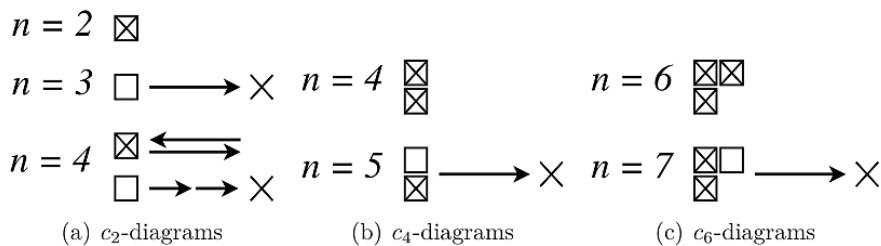


图 4-15 几种计算 c_{2i} 的图形^[4]

Fig.4-15 A few diagrams for calculating the EPLT coefficients ^[4]

由于我们只关注系统的相图，因此在这里只计算了玻色-哈伯德模型的朗道有效势理论的二阶系数。因为在Martin他们组的文章^[58]中，已经给出了有关

二阶系数的各阶微扰的详细的的信息，我们在这里只给出计算的结果和量子蒙特卡罗数值模拟结果的比较。有兴趣的读者可以去文章^[58]中得到更加详细的信息。我们也可以像在强耦合展开中的那样，将计算到的有限阶的结果外推到无穷阶。事实上，二阶的系数 c_2 可以对跃迁振幅展开为：

$$c_2(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-t)^n \alpha_2^{(n)} \quad (4-95)$$

就像在前面的章节中所讲的那样，相变发生在二阶系数 c_2 发散的时候，也就是要级数 $\sum_{n=0}^{\infty} (-t)^n \alpha_2^{(n)}$ 发散，这意味着临界的跃迁振幅 t_c 等于该级数的收敛半径，也就是：

$$t_c = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|\alpha_2^{n-1}|}{|\alpha_2^n|} \quad (4-96)$$

根据式(4-96)和前面算的数据，我们可以很容易的将有限阶的计算结果推广到无穷阶的时候，和德国奥德堡大学的Martin教授的组所得到的结果一样^[58]，图4-16中我们也可以看出这时有效势的计算结果和量子蒙特卡罗的计算结果基本重合。对比图4-16和图4-13我们发现，在二维的时候，朗道有效势理论的相图的误差也要小于强耦合展开方法，因此可以预计在3维的时候，朗道有效势理论的结果会好于同阶的强耦合展开的方法，因为朗道有效势理论更加的擅长于处理高维的系统。但是，就像在图中所看到的那样，对于强耦合展开方法来说，计算相图只需要计算上下两个边界的系数即可，而在用朗道有效势理论来计算相图时，我们需要对每一个不同的化学势进行计算，会大大的增大计算量。

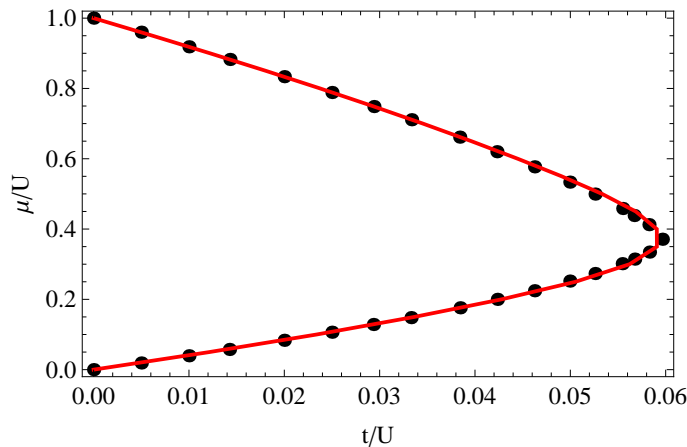


图 4-16 正方晶格相图的对比：红色的线表示朗道有效势理论的结果，黑色的点表示量子蒙特卡罗方法的结果

Fig.4-16 Comparison of phase diagram for square lattice system: the black dots and red solid line represent the EPLT and QMC results

总结一下，在这一小节中，我们将自己的程序和数值模拟的方法进行了对比，发现它的计算结果和精确的数值模拟的结果在普通的玻色-哈伯德模型中符合的非常好，由此证明了我们程序的正确性。在下一小节中，我们将用过程链算法计算伴随S-波周期性调制的光晶格中的玻色子系统的相图。

4.5.3 伴随S-波周期性调制的光晶格玻色子系统的量子相图

在振幅比较小的时候，S-波周期性振动的光晶格中的过程链算法和在普通的光晶格中的基本是相同的，我们需要修改的只是在第三步计算图形的时候，一个箭头不仅仅是表示所指向格点的粒子数增加和所背离的格点的粒子数的减少，它计算所得结果还需要乘以相邻格点粒子数之差的贝塞尔函数，因此，对该系统的计算只需要在原来的程序上做小幅度的改进就行。但是贝塞尔函数的出现会使得程序的计算量大为增加，从而极大的减慢计算速度。一个可行的解决方法是提前计算出不同的粒子数之差的贝塞尔函数的数值，将它们储存在一个向量中，当计算的时候只需要判断相邻粒子数之差的数值，然后直接代入向量中的相应数值即可。当振幅较大的时候，情况就变得比较复杂了，因为此时系统的凝聚点在 k 空间中可能会发生改变，此时，我们需要在 k 空间中计算系统的有效势。该计算的过程为：记录它们在实空间中生成的图，对每一幅图记录下起始点和终结点之间的矢量距离（如果我们始终将起始点设置为坐标原点，那么就只需要记录终结点的坐标），然后将相同的矢量距离的结果相加，再做傅里叶变换就能得到在 k 空间中的有效势。当然这会使程序变得更加复杂，在这里我们仅给出S-波周期性振动振幅小于等于2.42的时候的相图，因为在此时，0阶结果和1阶结果所给出的等效的跃迁振幅都是正的，而更高阶的结果的影响比较小，我们认为此时高阶的结果不会改变系统的凝聚点。

图4-17和4-18给出了不同振幅情况下的相图（外推到无穷阶）。为了检验程序的正确性，我们选择在S-波振幅为0.4的时候与蒙特卡罗的结果（图4-17中的蓝色点）进行对比，发现有效势的结果（绿色的线）和蒙特卡罗的结果符合的相当好。从图4-17中可以看出，随着s-波振幅的增大，系统的莫特态也会随着增大，这是因为贝塞尔函数会使等效的跃迁振幅减小。我们还可以看出，此时系统的相图和玻色-哈伯德模型的相图很类似。但是当系统的s-波振幅进一步增大的时候，我们发现系统的相图发生了改变。如图4-18所示，图中绿线表示S-波振幅为2.0时的相图，而黑色的虚线表示S-波振幅为2.4时的相图，这个时候的相图已经和玻色-哈伯德模型的相图有了明显的不同。现在我们可以排

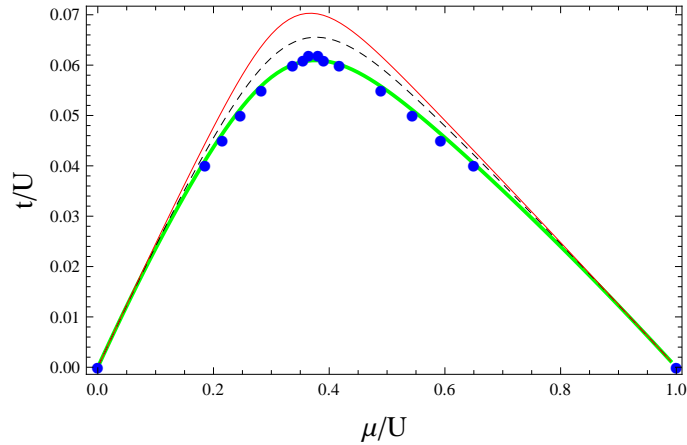


图 4-17 调制振幅较小时的相图：蓝色的点代表量子蒙特卡罗的结果，绿色的实线，黑色虚线和红色的线分别表示振幅为0.4，1.0和1.5的时候的结果

Fig.4-17 Phase diagram when the s-wave driven amplitude is small: The blue dots represents the QMC simulation results and the green, black and red line represent the EPLT results when the amplitude equals 0.4, 1.0 and 1.5 respectively

除低阶的结果的截断影响而可以断定在S-波周期性调制的振幅增大的时候，系统的临界性质发生了本质的变化。

4.6 未来关于S-波周期调制系统的研究计划

目前只介绍了能描述二阶相变的朗道有效势理论，因为我们假定随着S-波振幅的增大，系统从莫特绝缘态到超流态的相变仍然是一个连续相变。但是其实随着周期性调制振幅的增大，不能排除会发生一阶相变。以S-波周期性调制的振幅为2.42为例，考虑相变的临界点，我们知道在临界点附近系统是通过增大跃迁振幅来融化固体态的，但是由于此时系统的一个原子发生从一个格点跃迁到相邻格点的有效跃迁振幅为零，因此如果此时系统不存在一个外在的扰动，那么系统就可能不会发生从莫特绝缘态到超流态的相变，这与在一阶相变时的行为类似。因此这里来介绍一个可以描述包括一阶相变在内的更为广义的朗道有效势理论。就像前面的章节里介绍的那样，我们首先对系统的哈密顿量加上一个和产生（湮灭）算符耦合的流，然后可以得到系统的自由能对流的展开：

$$F = f_0 + c_2|j|^2 + c_4|j|^4 + c_6|j|^6 + O(|j|^8) \quad (4-97)$$

不同于之前只保留到四阶系数，这里保留到六阶系数是因为我们想处理的系统有可能会涉及到一阶的相变，而根据第一章的简介，对于一阶的相变的研究，

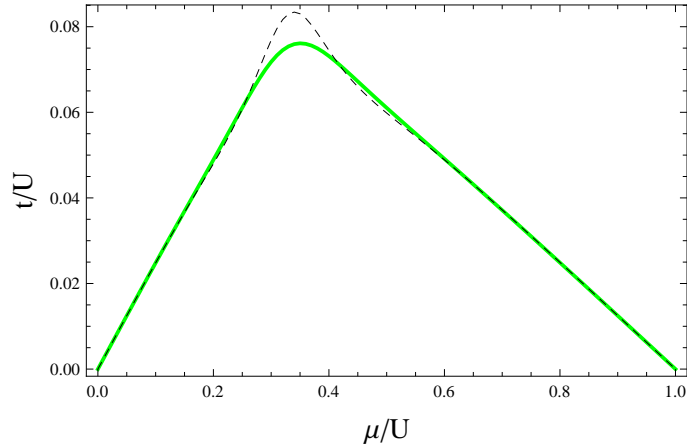


图 4-18 调制振幅较大时的相图，绿线的实线和黑色的虚线分别代表振幅为2.0和2.4时的结果

Fig.4-18 Phase diagram when the s-wave driven amplitude is large: The green solid line and black dashed line represent the EPLT results when the amplitude equals 2.0 and 2.4 respectively

必须要考虑系统的六阶系数，然后做勒让德变换：

$$\Gamma = F - j^* \psi - j \psi^* \quad (4-98)$$

可以得到系统的有效势的展开为：

$$\Gamma = f_0 - \frac{1}{c_2} |\psi|^2 + \frac{c_4}{c_2^4} |\psi|^4 + \left(\frac{c_6}{c_2^6} - \frac{4c_4}{c_2^7} \right) |\psi|^6 + O(|\psi|^8) \quad (4-99)$$

目前我们只计算了S-波周期性调制系统的二阶系数，对四阶和六阶系数的计算需要更多的时间来实现，但是这里我们仍然想来讨论系统的高阶系数对系统的性质的影响。首先来讨论系统在什么时候发生一阶的相变。实际上，如果系统的系数 a_4 总是大于零，那么系统毫无疑问将会发生二阶相变，但是如果 a_4 比 a_2 先到零，那么系统发生的就是一阶相变。而系统的凝聚分量可以通过有效势对于序参量求极值得到，在二阶相变的时候

$$|\psi|^2 = -\frac{a_2}{2a_4} \quad (4-100)$$

由于在相变的时候， a_2 由零逐渐的变化，因此也可以得出系统的凝聚分量也是连续的变化，而对于一阶相变来说，同样可以得到：

$$|\psi|^2 = \frac{1}{3} \frac{-a_4 + \sqrt{a_4^2 - 3a_2a_6}}{a_6} \quad (4-101)$$

由于一阶相变是在 a_2 还没有减小到零的时候发生的，因此我们可以知道，相变发生的时候，系统的凝聚参量发生了突变。

更为有趣的是研究系统的临界性质随着S-波周期调制振幅的增大的变化。

下面来介绍怎样运用过程链方法来计算系统的超流密度。超流密度的定义为当系统整个的以一个恒定的速度运动时，系统中保持静止的那一部分。一般来说，我们通过给系统一个扭曲的微小角度 θ 来求解系统的超流密度 ρ_{sf} 。这相当于给了系统的波函数一个相位 ϕ_x ，而系统的速度是与波函数的相位相关的

$$v_s = \frac{\hbar}{m} \nabla \phi \quad (4-102)$$

而 ϕ 和系统的扭曲角度 θ 之间的关系为：

$$\phi = \frac{\theta x}{L} \quad (4-103)$$

式中 L 是系统的总长度。这样可以得到系统的超流速度为 $v_s = \hbar\theta/mL$ 。如果我们将粒子的质量用其有效质量 $2J$ 来代替，并将系统的有效势之差与系统超流部分的动能联系起来，可以得到

$$\Gamma_\theta - \Gamma_0 = \frac{1}{2} \rho_{sf} M (2J) \left(\frac{\hbar\theta}{2JL} \right)^2 \quad (4-104)$$

进而可以得到超流密度的计算公式：

$$\rho_{sf} = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{1}{MJ} \left(\frac{L}{a\theta} \right)^2 (\Gamma_\theta - \Gamma_0) \quad (4-105)$$

在上式中 M 表示系统的总粒子数，而 a 是系统的晶格常数。

就像上边所标示的那样，如果我们能计算该系统的 a_2 、 a_4 以及 a_6 ，就能够判断在振幅大的时候，系统的相图是否会发生根本的变化。如果我们能够对系统给一个扭曲的角度，并计算这个时候的有效势，就能够计算系统的超流密度，从而得知系统的临界超流密度随着系统的振幅的变化。然而，如果要回答系统的布洛赫带或者它的激发谱怎样随着振幅来改变的时候，就必须要进一步的发展过程链的的算法，从实空间中的计算到傅里叶变换的 ω 空间的计算。

我们下一步要做的另一个主要工作就是在发展怎样用Kato表示来计算零温时的实时朗道-金兹堡理论的高阶表示。这个工作是很有意义的，因为它可以告诉我们系统的动态信息，尤其是高维系统的动态信息，从而丰富我们研究系统的动力学性质的手段。那么这项研究是否是可行的呢？我们首先来看看计算含时的有效势的步骤：首先在原来的玻色-哈伯德哈密顿量上加上与产生（湮灭）算符耦合的与时间相关的流。然后将系统的含时的自由能（零温时就是系统的基态）对流和系统的跃迁项展开，再做傅里叶变换将含时的问题转化到 ω 的空间中进行计算得到自由能的展开系数。系统的有效势是通过对自由能做勒让德变换得到，据此我们可以得到有效势对于序参量展开的系数和自由能展开的系数之间的关系，从而得到系统的有效势。可以看到上述的计算过程与在求不含时的有效势的时候有很多相似的地方，我们都只需要求出自由能展开的系数即

可。在Santos的博士论文中^[8]指出，系统的含时的自由能的展开在 ω 空间中也可以用图形来表示，因此我们只需要用电脑来找出这些图形的最简形式以及他们的系数即可。另外最后对这些图形的计算也可以用Kato表示。当然找这些最简的图形也并不是一件容易的事情，还需要我们仔细的思考。

4.7 本章小结

在本章中，我们首先介绍了在周期性调制的光晶格中前人的一些理论工作和实验工作，证明这种看似是非稳的系统其实可以看成是一种稳定的系统，如果以Floquet态来重新定义系统的玻色-爱因斯坦凝聚，我们发现该系统中仍然存在玻色-爱因斯坦凝聚，只不过不再是凝聚在能量最低的能级上，而是凝聚在平均能量最低的Floquet能级上。我们首先运用Floquet理论将S-波周期调制的光晶格系统映射到一个与时间无关的哈密顿量上，然后运用了多种方法来分析二维和三维的系统的相图。通过对系统相图的临界点的分析，我们猜测该系统可以映射到一种很简单的新的类似玻色-哈伯德模型的哈密顿量上，进一步的理论工作证明了我们猜测的正确性，并且由此可以得出，该系统和玻色-哈伯德模型属于同一类。当然，上述所有结论都是基于系统参数在 $A/\hbar\omega < 1.52$ 的时候。在周期性调制振幅更大的时候，我们运用过程链算法计算了系统的精确的相图，发现系统的临界性质确实发生了根本性的变化，这种变化的原因还需要进一步的探讨。在最后，我们给出了未来的研究计划。

结 论

在本篇论文中，我们用多种解析和数值方法研究了调制光晶格中的玻色子系统的量子相变的相图和其临界性质。我们的研究包括多种不同几何形状的超光晶格系统以及伴随S-波散射长度周期性调制的光晶格中玻色子系统。本文的主要创新点有以下几条：

首先我们把研究高维光晶格系统中很好的解析方法——朗道有效势理论从单参数的情况推广到了多参数的情况，这种推广是以后该方法能运用到更为复杂的系统的关键。由于实验上的超光晶格和相邻相互作用的光晶格等这些复杂的光晶格的出现，原有的方法已经不能解决这些系统中的量子相变问题，而该理论的推广使得我们的理论研究能够更好的指导实验的发展。

其次我们用这种推广的朗道有效势理论得到了各种超光晶格的相图，包括正方超晶格，立方超晶格，三角超晶格，笼壁超晶格。研究发现，由于系统的平移对称性的破坏，系统中出现了分数填充的密度波态。而且随着超光晶格中的不同子系统的化学势差的增大，系统的莫特绝缘态随之减小，而密度波态随之增大。我们的研究也给后续对超光晶格的相图的研究提供了数据参考。

第三，我们研究了笼壁超光晶格系统中相边界附近的超流密度。研究表明，系统的超流密度在 x 和 y 方向是不同的，这表明人们应该把超流密度看成是一个张量，而不是一个标量。并且我们发现随着系统的填充数的变化， x 和 y 方向的超流密度呈现一种交替领先的状态。我们也计算出了这种交替领先的超流密度在不同的状态时所对应的TOF图像，提出实验上可以通过TOF来观察到这种现象，为以后实验上对这种系统的研究提供了理论支持。

第四，我们研究了伴随S-波周期性振动光晶格中玻色子系统的相图和临界性质。研究发现，虽然系统存在周期性的变化，但是仍然存在从莫特绝缘态到超流态的相变。我们给出了在系统的振幅 $A/\hbar\omega < 1.52$ 时，二维和三维系统的相图。进一步的研究表明，如果重新标度系统的跃迁幅度，可以用一个类似于玻色-哈伯德系统的哈密顿量来描述该系统。进一步的数值模拟结果表明，这种新的等效哈密顿量不仅能够很好的描述系统的相图，还能很好的描述系统的临界性质，由此揭示了S-波周期性振动的系统和玻色-哈伯德系统具有相同的临界行为。

第五，我们用过程链算法研究了S-波周期性振动的正方光晶格在振幅幅度较大的时候的相图。我们的研究揭示了在系统的振幅增大到 $A/\hbar\omega > 2$ 时，系统

的相图会发生明显的变化，这揭示了在系统的振幅增大到一定程度后，系统的临界性质会发生变化。这表明S-波周期性调制这种手段可以调节的行为远比人们原来认为的要丰富——它不仅可以使系统发生从莫特绝缘态到超流态的相变，并且能够调节系统的临界性质。

在未来，我们会在以下几个方面来深化研究：

首先，本文对于超光晶格相图的研究都是在零温的时候，在未来的研究中，需要考虑温度对系统的相图的影响，以便能与实验的结果相对比。

其次，对于S-波周期性振动的系统，我们只是从系统的相图的变化推测出其临界性质的改变，具体的临界性质如何改变才是更有意思的课题。在未来，这是研究的重点。

第三，对于过程链算法的发展和改进。如果能够发展在 k 空间中的过程链算法，那么将来就有可能解决高维玻色子系统的动态问题。目前人们还缺乏解决这些问题的方法，我们将来会尝试展开这方面的工作。

本论文仅仅选择了两种调制的光晶格系统来作为研究的对象，实际上还存在其他值得研究的调制光晶格系统：比如AC调制系统，它可以驱动系统发生从超流态到莫特态的相变，也可以使得跃迁项出现一个相位项，从而导致系统可以模拟更为复杂的模型，如X-Y模型。再比如S-波周期性调制的阻错系统，这种更为复杂的周期调制系统目前还缺乏理论和实验研究，但可以肯定的是，阻错的引入会使得系统的量子性质更为复杂，开展这方面的研究也将是很有意义的工作。

参考文献

- [1] S. N. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. Z. Phys[J]. 1924, **26**: 178-181.
- [2] A. Einstein. Sitz. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. Quantentheorie Des Einatomigen Idealen Gases[B], 1924, 3-261.
- [3] W. D. Phillips, P. L. Gould, and P. D. Lett. Cooling, Stopping, and Trapping Atoms[J]. Science, 1988, **239**: 877-883.
- [4] D. Hinrichs. Critical Properties of the Bose-Hubbard Model[D]. Phd theses of Carl von Ossietzky University Oldenburg, 2012: 1-32.
- [5] Q. Niu, X. G. Zhao, G. A. Georgakis, and M. G. Raizen. Atomic Landau-Zener Tunneling and Wannier-Stark Ladders in Optical Potentials[J]. Phys. Rev. Lett., 1996, **76**, 4504.
- [6] B. P. Anderson and M. A. Kasevich. Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays[J]. Science, 1998, **282**:1686-1689.
- [7] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor[J]. Science, 1995, **269**:198-201.
- [8] F.E. A. Santos. Ginzburg-Landau Theory for Bosonic Gases in Optical Lattices[D]. PhD thesis, Free University of Berlin, 2011: 17-28.
- [9] Matthew P. A. Fisher, Peter B. Weichman, G. Grinstein, and Daniel S. Fisher. Boson Localization and the Superfluid-Insulator Transition[J]. Phys. Rev. B, 1989, **40**, 546.
- [10] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hansch, and I. Bloch. Quantum Phase Transition From a Superfluid to a Mott Insulator in a Gas of Ultracold Atoms[J]. Nature, 2002, **415**: 39-44.
- [11] I. Bloch, J. Dalibard and S. Nascimbene. Quantum simulations with ultracold quantum gases[J]. Nature Phys., 2002, **8**: 267-276.
- [12] I. Bloch. Ultracold quantum gases in optical lattices[J]. Nature Phys., 2005, **1**: 23-30.
- [13] S. Piel, J. V. Porto, B. Laburthe Tolra, J. M. Obrecht, B. E. King, M. Subbotin, S. L. Rolston, and W. D. Phillips[J]. Phys. Rev. A, 2003, **67**, 051603(R).

- [14] J. Sebby-Strabley, M. Anderlini, P. S. Jessen, and J. V. Porto. Patterned Loading of a Bose-Einstein Condensate into an Optical Lattice[J]. *Phys. Rev. A*, 2006, **73**, 033605.
- [15] M. Greiner, O. Mandel, T. W. Hansch, and I. Bloch. Collapse and Revival of the Matter Wave Field of a Bose-Einstein Condensate[J]. *Nature*, 2002, **419**: 51–54.
- [16] S. Fölling, S. Trotzky, P. Cheinet, M. Feld, R. Saers, A. Widera, T. Müller and I. Bloch, Direct Observation of Second-Order Atom Tunnelling[J]. *Nature*, 2007, **448**: 1029–1032.
- [17] P. Cheinet, S. Trotzky, M. Feld, U. Schnorrberger, M. Moreno-Cardoner, S. Fölling, and I. Bloch, Counting Atoms Using Interaction Blockade in an Optical Superlattice. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **101**, 090404.
- [18] A. Hemmerich, M. Weidemüller, T. Esslinger, C. Zimmermann, and T. Hansch. Trapping Atoms in a Dark Optical Lattice[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1995 **75**, 37.
- [19] G. Grynberg, B. Lounis, P. Verkerk, J.-Y. Courtois, and C. Salomon. Quantized Motion of Cold Cesium Atoms in Two- and Three-Dimensional Optical Potentials[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**, 2249.
- [20] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **75**, 3969.
- [21] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger. Many-Body Physics with Ultracold Gases[J]. *Rev of Modern Physics*, 2008, **80**, 885.
- [22] K. D. Nelson, X. Li, and D. S. Weiss. Imaging Single Atoms in a Three-Dimensional Array[J]. *Nature Phys.*, 2007, **3**: 556–560.
- [23] T. Gericke, P. Würtz, D. Reitz, T. Langen, and H. Ott. High-Resolution Scanning Electron Microscopy of An Ultracold Quantum Gas[J]. *Nature Phys.*, 2008, **4**: 949–953.
- [24] P. Würtz, T. Langen, T. Gericke. A. Koglbauer, and H. Ott. Experimental Demonstration of Single-Site Addressability in a Two-Dimensional Optical Lattice[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, **103**, 080404.
- [25] N. Gemelke, X. Zhang, C.-L. Hung, and C. Chin. In Situ Observation of Incompressible Mott-Insulating Domains in Ultracold Atomic Gases[J]. *Nature*, 2009, **460**: 995–998.

-
- [26] M. Karski, L. Förster, J. M. Choi, W. Alt, A. Widera, and D. Meschede. Nearest-Neighbor Detection of Atoms in a 1D Optical Lattice by Fluorescence Imaging[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, **102**, 053001.
- [27] W. S. Bakr, J. I. Gillen, A. Peng, S. Fölling, and M. Greiner. Nearest-Neighbor Detection of Atoms in a 1D Optical Lattice by Fluorescence Imaging[J]. *Nature*, 2009, **462**: 74–77.
- [28] C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schauß, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr. Single-Spin Addressing in an Atomic Mott Insulator[J]. *Nature*, 2011, **471**: 319–324.
- [29] Dieter Jaksch, C. Bruder, J.I. Cirac, C.W. Gardiner, and P. Zoller. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**, 3108.
- [30] J. K. Freericks and H. Monien. Strong-Coupling Expansions for the Pure and Disordered Bose-Hubbard model[J]. *Phys. Rev. B*, 1996, **53**, 2691.
- [31] T. McIntosh, P. Pisarski, R. J. Gooding, and E. Zaremba. Multisite Mean-Field Theory for Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. A*, 2012, **86**, 013623.
- [32] Martin P. Gelfand and Rajiv R. P. Singh. High-Order Convergent Expansions for Quantum Many Particle Systems[J]. *Advances in Physics*, 1999, **49**: 93-140.
- [33] N. Elstner and H. Monien. A Numerical Exact Solution of the Bose-Hubbard Model[J]. *arXiv:cond-mat/9905367*, 2013.
- [34] Martin P. Gelfand. Series Expansions For Excited States of Quantum Lattice Models[J]. *Solid State Communications*, 1996, **98**: 1-14.
- [35] S. R. White. Density-Matrix Algorithms for Quantum Renormalization Groups[J]. *Phys. Rev. B*, 1993, 10345.
- [36] U. Schollwock. The Density-Matrix Renormalization Group[J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2005, **77**, 259.
- [37] A. W. Sandvik. Stochastic Series Expansion Method with Operator-Loop Update[J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **59**, R14157.
- [38] O. F. Syljuasen and A. W. Sandvik. Quantum Monte Carlo with Directed Loops[J]. *Phys. Rev. E*, 2002, **66**, 046701.
- [39] H. M. Guo, Y. C. Wen and S. P. Feng. Cold Atoms on a Two-Dimensional Square Optical Lattice with an Alternating Potential[J]. *Phys. Rev. A*, 2009, **79**, 035401.

- [40] X.-F. Zhang, R. Dillenschneider, Y. Yu, and S. Eggert. Supersolid Phase Transitions for Hard-Core Bosons on a Triangular Lattice[J]. *Phys. Rev. B*, 2011, **84**, 174515.
- [41] Adrian E. Feiguin and Steven R. White, Time-Step Targeting Methods for Real-Time Dynamics Using the Density Matrix Renormalization Group[J]. *Phys. Rev. B*, 2005, **72**, 020404(R).
- [42] Y.-A. Chen, S. Nascimbene, M. Aidelsburger, M. Atala, S. Trotzky, and I. Bloch. Controlling Correlated Tunneling and Superexchange Interactions with ac-Driven Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, **107**, 210405.
- [43] P. Buonsante and A. Vezzani. Phase Diagram for Ultracold Bosons in Optical Lattices and Superlattices[J]. *Physics Rev. A*, 2004, **70**, 033608.
- [44] P. Buonsante and A. Vezzani. Cell Strong-Coupling Perturbative Approach to the Phase Diagram of Ultracold Bosons in Optical Superlattices[J]. *Phys. Rev. A*, 2005, **72**, 013614.
- [45] P. Buonsante, V. Penna, and A. Vezzani. Fractional-Filling Mott Domains in Two-Dimensional Optical Superlattices[J]. *Phys. Rev. A*, 2005, **72**, 031602(R).
- [46] V. G. Rousseau, D. P. Arovas, M. Rigol, F. Hébert, G. G. Batrouni, and R. T. Scalettar. Exact Study of the One-Dimensional Boson Hubbard Model with a Superlattice Potential[J]. *Phys. Rev. B*, 2006, **73**, 174516.
- [47] M. Hild, F. Schmitt, I. Türschmann, and R. Roth. Ultracold Bose Gases in Time-Dependent One-Dimensional Superlattices: Response and Quasimomentum Structure[J]. *Phys. Rev. A*, 2007, **76**, 053614.
- [48] B.-L. Chen, S.-P. Kou, Y. Zhang, and S. Chen. Quantum Phases of the Bose-Hubbard Model in Optical Superlattices[J]. *Phys. Rev. A*, 2010, **81**, 053608.
- [49] A. Dhar, T. Mishra, R. V. Pai, and B. P. Das. Quantum Phases of Ultracold Bosonic Atoms in a One-Dimensional Optical Superlattice[J]. *Phys. Rev. A*, 2011, **83**, 053621.
- [50] Drese, K. and Holthaus, M. Exploring a Metal-Insulator Transition with Ultracold Atoms in Standing Light Waves[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **78**, 2932–2935.
- [51] Lignier, H., Sias, C., Ciampini, D., Singh, Y., Zenesini, A., Morsch, O., Arimondo, E., Dynamical Control of Matter-Wave Tunneling in Periodic Potentials[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, **99**, 220403.

-
- [52] C. Sias, H. Lignier, Y. P. Singh, A. Zenesini, D. Ciampini, O. Morsch, and E. Arimondo. Observation of Photon-Assisted Tunneling in Optical Lattices[J]. Phys. Rev. Lett., 2008, **100**, 040404.
- [53] E. Kierig, U. Schnorrberger, A. Schietinger, J. Tomkovic, and M. K. Oberthaler. Single-Particle Tunneling in Strongly Driven Double-Well Potentials[J]. Phys. Rev. Lett., 2008, **100**, 190405.
- [54] A. Zenesini, H. Lignier, D. Ciampini, O. Morsch, and E. Arimondo. Coherent Control of Dressed Matter Waves[J]. Phys. Rev. Lett., 2009, **102**, 100403.
- [55] J. Struck, C. Olschlager, R. Le Targat, P. Soltan-Panahi, A. Eckardt, M. Lewenstein, P. Windpassinger, K. Sengstock. Quantum Simulation of Frustrated Classical Magnetism in Triangular Optical Lattices[J]. Science, 2011, **333**, 996–999.
- [56] J. Struck, M. Weinberg, C. Ölschläger, P. Windpassinger, J. Simonet, K. Sengstock, R. Höppner, P. Hauke, A. Eckardt, M. Lewenstein, and L. Mathey. Engineering Ising-XY Spin-Models in a Triangular Lattice Using Tunable Artificial Gauge Fields[J]. Nature Physics, 2013, **9**: 738–743.
- [57] S. E. Pollack, D. Dries, and R. G. Hulet, K. M. F. Magalhães, E. A. L. Henn, E. R. F. Ramos, M. A. Caracanhas, and V. S. Bagnato. Collective Excitation of a Bose-Einstein Condensate by Modulation of the Atomic Scattering Length[J]. Phys. Rev. A, 2010, **81**, 053627.
- [58] M. Holthaus. Towards Coherent Control of a Bose-Einstein Condensate in a Double Well[J]. Phys. Rev. A, 2001, **64**, 011601.
- [59] A. Eckardt, T. Jinasundera, C. Weiss, and M. Holthaus. Analog of Photon-Assisted Tunneling in a Bose-Einstein Condensate[J]. Phys. Rev. Lett., 2005, **95**, 200401.
- [60] A. Eckardt, C. Weiss, and M. Holthaus. Superfluid-Insulator Transition in a Periodically Driven Optical Lattice[J]. Phys. Rev. Lett., 2005, **95**, 260404.
- [61] A. Eckardt and M. Holthaus. AC-Induced Superfluidity[J]. Europhys. Lett., 2007, **80**, 50004.
- [62] A. Eckardt and M. Holthaus: Avoided-Level-Crossing Spectroscopy with Dressed Matter Waves[J]. Phys. Rev. Lett., 2008, **101**, 245302.
- [63] A. Tokuno and T. Giamarchi. Spectroscopy for Cold Atom Gases in Periodically Phase-Modulated Optical Lattices[J]. Phys. Rev. Lett., 2011, **106**, 205301.

- [64] N. Tsuji, T. Oka, P. Werner, and H. Aoki. Dynamical Band Flipping in Fermionic Lattice Systems: An ac-Field-Driven Change of the Interaction from Repulsive to Attractive[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, **106**, 236401.
- [65] A. Rapp, X. Deng, and L. Santos, Ultracold Lattice Gases with Periodically Modulated Interactions[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **109**, 203005.
- [66] F.E.A. dos Santos and A. Pelster. Quantum Phase Diagram of Bosons in Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. A*, 2009, **79**, 013614.
- [67] Stephen M. Barnett and Paul M. Radmore. *Methods in Theoretical Quantum Optics*[T]. Oxford University Press, 1997.
- [68] P. S. Julienne, C. J. Williams, Y. B. Band, and Marek Trippenbach. Loading Bose-Einstein-Condensed Atoms into the Ground State of an Optical. Lattice[J]. *Phys. Rev. A*, 2005, **72**, 053615.
- [69] E. I. Blount. *Solid state physics: Advances in Research and Applications*, Chapter Formalisms of Band Theory[B]. Academic Press, 1962: 305-305.
- [70] G. Roux, T. Barthel, I. P. McCulloch, C. Kollath, U. Schollwöck, and T. Giamarchi. Quasiperiodic Bose-Hubbard model and Localization in One-Dimensional Cold Atomic Gases[J]. *Phys. Rev. A*, 2008, **78**, 023628.
- [71] A. Dhar, T. Mishra, R. V. Pai, and B. P. Das. Quantum Phases of Ultracold Bosonic Atoms in a One-Dimensional Optical Superlattice[J]. *Phys. Rev. A*, 2011, **83**, 053621.
- [72] Alexander Hoffmann. *Bosonen im Optischen Gitter*[M]. Diploma thesis, Free University of Berlin, 2009: 11-20.
- [73] Tiesinga, E., B. J. Verhaar, and H. T. C. Stoof, Threshold and Resonance Phenomena in Ultracold Ground-State Collisions[J]. *Phys. Rev. A*, 1993 **47**, 4114.
- [74] B. Bradlyn, F.E.A. dos Santos, and A. Pelster. Effective Action Approach for Quantum Phase Transitions in Bosonic Lattices[J]. *Phys. Rev. A*, 2009, **79**, 013615.
- [75] André Eckardt. Process-Chain Approach to High-Order Perturbation Calculus for Quantum Lattice Models[J]. *Phys. Rev. B*, 2009, **79**, 195131.
- [76] N. Teichmann, D. Hinrichs, and M. Holthaus and A. Eckardt. Process-Chain Approach to the Bose-Hubbard Model: Ground-State Properties and Phase Diagram[J]. *Phys. Rev. B*, 2009, **79**, 224515.
- [77] D. Hinrichs, A. Pelster, and M. Holthaus, Perturbative Calculation of Critical Exponents for the Bose-Hubbard Model[J]. *Applied Physics B*, 2013, **113**, 57-67.

-
- [78] M. E. Fisher. The Renormalization Group in the Theory of Critical Behavior[J]. *Rev. Mod. Phys.*, 1974, **4**, 597.
- [79] A. Hoffmann and A. Pelster. Visibility of Cold Atomic Gases in Optical Lattices for Finite Temperatures[J]. *Phys. Rev. A*, 2009, **79**, 053623.
- [80] T. D. Graß, F. E. A. dos Santos, and A. Pelster. Excitation Spectra of Bosons in Optical Lattices from the Schwinger-Keldysh Calculation[J]. *Phys. Rev. A*, 2011, **84**, 013613.
- [81] L. jin, J. Zhang, and Y. Jiang. Quantum Phase Transitions of Ultracold Bose Systems in Nonrectangular Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. A*, 2012, **85**, 023619.
- [82] M. Ohliger and A. Pelster. Green's Function Approach to the Bose-Hubbard Model[J]. *World J. Cond. Matt. Phys.*, 2013, **3**: 125-130.
- [83] G. E. Akpojotor. Ultracold Atoms in Superlattices as Quantum Simulators for a Spin Ordering Model and Phenomena [J]. *Advances in Physics Theories and Applications*, 2012, **6**:15-23.
- [84] C. Krumnow and A. Pelster. Dipolar Bose-Einstein Condensates with Weak Disorder[J]. *Phys. Rev. A*, 2011, **84**, 021608(R).
- [85] B. Nikolić, A. Balaz, and A. Pelster. Dipolar Bose-Einstein condensates in weak anisotropic disorder[J]. *Phys. Rev. A*, 2013, **88**, 013624.
- [86] J. P. A. Devreese, J. Tempere, and C. A. R. Sáde Melo. Effects of Spin-Orbit Coupling on the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Transition and the Vortex-Antivortex Structure in Two-Dimensional Fermi Gases[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, **113**, 165304.
- [87] M. Ghabour and A. Pelster. Bogoliubov Theory of Dipolar Bose Gas in a Weak Random Potential[J]. *Phys. Rev. A*, 2014, **90**, 063636.
- [88] C. Becker, P. Soltan-Panahi, J. Kronjaer, S. Doscher, K. Bongs and K. Sengstock. Ultracold Quantum Gases in Triangular Optical Lattices[J]. *New Journal of Physics*, 2010, **12**, 065025.
- [89] Gyu-Boong Jo, J. Guzman, C. K. Thomas, P. Hosur, A. Vishwanath and D.M. Stamper-Kurn. Ultracold Atoms in a Tunable Optical Kagome Lattice[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **108**, 045305.
- [90] Private Discussion with Professor Y. Jiang in Shanghai University.

- [91] R. G. Melko, A. W. Sandvik, and D. J. Scalapino. Aspect-Ratio Dependence of the Spin Stiffness of a Two-Dimensional XY Model[J]. *Phys. Rev. B*, 2004, **69**, 014509.
- [92] A. Eckardt, C. Weiss, and M. Holthaus. Superfluid-Insulator Transition in a Periodically Driven Optical Lattice[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**, 260404.
- [93] H. Lignier, C. Sias, D. Ciampini, Y. Singh, A. Zenesini, O. Morsch, and E. Arimondo. Dynamical Control of Matter-Wave Tunneling in Periodic Potentials[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, **99**, 220403.
- [94] E. Kierig, U. Schnorrberger, A. Schietinger, J. Tomkovic, and M. K. Oberthaler. Particle Tunneling in Strongly Driven Double-Well Potentials[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **100**, 190405.
- [95] J. Struck, C. Ölschläger, R. Le Targat, P. Soltan-Panahi, A. Eckardt, M. Lewenstein, P. Windpassinger, and K. Sengstock. Quantum Simulation of Frustrated Classical Magnetism in Triangular Optical Lattices[J]. *Science*, 2011, **333**: 996-999.
- [96] J. Struck, C. Ölschläger, M. Weinberg, P. Hauke, J. Simonet, A. Eckardt, M. Lewenstein, K. Sengstock, P. Windpassinger. Tunable Gauge Potential for Neutral and Spinless Particles in Driven Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **108**, 225304.
- [97] P. Hauke, O. Tieleman, A. Celi, C. Ölschläger, J. Simonet, J. Struck, M. Weinberg, P. Windpassinger, K. Sengstock, M. Lewenstein, and A. Eckardt. Non-Abelian Gauge Fields and Topological Insulators in Shaken Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **109**, 145301.
- [98] M. Aidelsburger, M. Atala, M. Lohse, J. T. Barreiro, B. Paredes, and I. Bloch. Realization of the Hofstadter Hamiltonian with Ultracold Atoms in Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, **111**, 185301.
- [99] H. Miyake, G. A. Siviloglou, C. J. Kennedy, W. C. Burton, and W. Ketterle. Realizing the Harper Hamiltonian with Laser-Assisted Tunneling in Optical Lattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, **111**, 185302.
- [100] E. R. F. Ramos, E. A. L. Henn, J. A. Seman, M. A. Caracanhas, K. M. F. Magalhaes, K. Helmerson, V. I. Yukalov, and V. S. Bagnato. Generation of Nonground-State Bose-Einstein Condensates by Modulating Atomic Interactions[J]. *Phys. Rev. A*, 2008, **78**, 063412.

-
- [101] S. E. Pollack, D. Dries, R. G. Hulet, K. M. F. Magalhaes, E. A. L. Henn, E. R. F. Ramos, M. A. Caracanhas, and V. S. Bagnato. Collective Excitation of a Bose-Einstein Condensate by Modulation of the Atomic Scattering length[J]. *Phys. Rev. A*, 2010, **81**, 053627.
- [102] S. E. Pollack, D. Dries, M. Junker, Y. P. Chen, T. A. Corcovilos, and R. G. Hulet. Extreme Tunability of Interactions in a Li Bose-Einstein Condensate[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, **102**, 090402.
- [103] I. Vidanovic, A. Balaz, H. Al-Jibbouri, and A. Pelster. Nonlinear Bose-Einstein Condensate Dynamics Induced by a Harmonic Modulation of the S-Wave Scattering Length[J]. *Phys. Rev. A*, 2011, **84**, 013618.
- [104] Shirley, J. H. Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time[J]. *Phys. Rev.* 1965, **138**, B979–B987.
- [105] E. Arimondo, D. Ciampini, A. Eckardt, M. Holthaus, and O. Morsch. KiloHertz-Driven Bose-Einstein Condensates in Optical Lattices[J]. *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, 2012, **61**: 515–547.
- [106] A. Eckardt and M. Holthaus. Avoided-Level-Crossing Spectroscopy with Dressed Matter Waves[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **101**, 245302.
- [107] D. S. Rokhsar and B. G. Kotliar. Gutzwiller Projection for Bosons[J]. *Phys. Rev. B*, 1991, **44**, 10328.
- [108] W. Krauth, M. Caffarel, and J.-P. Bouchaud. Gutzwiller Wave Function for a Model of Strongly Interacting Bosons[J]. *Phys. Rev. B*, 1992, **45**, 3137.
- [109] W. Zwerger. Mott-Hubbard Transition of Cold Gases in An Optical Lattice[J]. *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.*, 2003, **5**, S9.
- [110] P. Buonsante and V. Penna. Some Remarks on the Coherent-State Variational Approach to Nonlinear Boson Models[J]. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 2008, **41**, 175301.
- [111] C. Trefzger, C. Menotti, B. Capogrosso-Sansone, and M. Lewenstein. Ultracold Dipolar Gases in Optical Lattices[J]. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2011, **44**, 193001.
- [112] D. S. Lühmann. Cluster Gutzwiller Method for Bosonic Lattice Systems[J]. *Phys. Rev. A*, 2013, **87**, 043619.
- [113] X.-F. Zhang, Y.-C. Wen, and S. Eggert. Static Impurities in a Supersolid of Interacting Hard-Core Bosons on a Triangular Lattice[J]. *Phys. Rev. B*, 2010, **82**, 220501(R).

- [114] X.-F. Zhang and S. Eggert. Chiral Edge States and Fractional Charge Separation in a System of Interacting Bosons on a Kagome Lattice[J]. Phys. Rev. Lett., 2013, **111**, 147201.
- [115] J. Zinn-Justin. Quantum Field Theory and Critical Phenomena[B]. 4th ed. (Oxford University Press, Oxford, 2002).
- [116] H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde. Critical Properties of Φ^4 Theories[B]. (World Scientific, Singapore, 2001).

攻读博士学位期间发表的论文及其他成果

(一) 发表的学术论文

- [1] T. Wang, X.-F. Zhang, S. Eggert, and A. Pelster. Generalized Effective Potential Landau Theory for Bosonic Superlattices. *Physical Review A* **87**, 063615/1-9 (2013). (SCI 收录, IF=2.991, 对应论文第二章, 第一作者)
- [2] T. Wang, X.-F. Zhang, F.E.A. dos Santos, S. Eggert, and A. Pelster. Tuning the Quantum Phase Transition of Bosons in Optical Lattices via Periodic Modulation of s-Wave Scattering Length. *Physical Review A* **90**, 013633 (2014). (SCI 收录, IF=2.991, 对应论文第四章, 第一作者)
- [3] T. Wang, G.-X. Tang, and C.-F. Hou. Quantum Phase Diagram of Triangular Superlattice System. *European Physical Journal D*, Volume **69**, number 2(2015). (SCI 收录, IF=1.398, 对应论文第三章, 第一作者)

哈尔滨工业大学学位论文原创性声明和使用权限

学位论文原创性声明

本人郑重声明：此处所提交的学位论文《调制光晶格中玻色子系统的量子相变以及临界性质的研究》，是本人在导师指导下，在哈尔滨工业大学攻读学位期间独立进行研究工作所取得的成果，且学位论文中除已标注引用文献的部分外不包含他人完成或已发表的研究成果。对本学位论文的研究工作做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式注明。

作者签名：  日期： 2015 年 7 月 16 日

学位论文使用权限

学位论文是研究生在哈尔滨工业大学攻读学位期间完成的成果，知识产权归属哈尔滨工业大学。学位论文的使用权限如下：

(1) 学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存研究生上交的学位论文，并向国家图书馆报送学位论文；(2) 学校可以将学位论文部分或全部内容编入有关数据库进行检索和提供相应阅览服务；(3) 研究生毕业后发表与此学位论文研究成果相关的学术论文和其他成果时，应征得导师同意，且第一署名单位为哈尔滨工业大学。

保密论文在保密期内遵守有关保密规定，解密后适用于此使用权限规定。

本人知悉学位论文的使用权限，并将遵守有关规定。

作者签名：  日期： 2015 年 7 月 16 日

导师签名：  日期： 2015 年 7 月 16 日

致 谢

衷心感谢导师侯春风教授对本人的精心指导。他的言传身教将使我终生受益。在学术上，他总是鼓励我去做自己想做的东西，鼓励我按照自己的想法来。还要感谢他对我出国的支持，当时连出国的押金都是侯老师借给我钱交的。另外还要感谢他在博士论文期间对我的帮助和支持。在攻读博士学位的四年中，恩师和师母给予了我无微不至的关心和帮助，借此机会向恩师及师母表示我最诚挚的谢意。

感谢Axel Pelster教授，我的工作大部分是在他的小组完成的，他对学术的严谨，一丝不苟的工作态度深深的影响着我。特别感谢我的师兄张学锋博士，他不仅跟我一起完成了许多的科研工作，更是教了我很多科研的方法，在德国期间，在生活上他也给了我很多的帮助，他是我终身学习的榜样和目标。感谢应涛博士、张伟华同学、唐圭新教授，他们和我一起度过了很多科研的时光，给了我很多生活和学习上的帮助。

最后感谢我的父母以及妻子对自己的科研的支持。父母一直支持我的学习，妻子更是在女儿出生之后，挑起了照顾女儿的重担，而支持我返校完成博士论文。他们都对我付出了很多。

本课题承蒙CSC基金资助，特此致谢。

个人简历

本人于1985年9月27日出生于湖北黄冈市团风县马曹庙镇磨石山村。

2005年9月考入哈尔滨工业大学理学院物理系光信息科学与技术专业，2009年7月本科毕业并获得理学学士学位。2009年7月——在哈尔滨工业大学理学院物理系光学学科博士在读。其中2011年10月——2013年10月在柏林自由大学交流访问。

获奖情况：曾获得过校级的三好学生称号，获得过两次二等奖学金，四次三等奖学金。